



Modélisation du comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables en fatigue pure et en fatigue-relaxation

Fatima Hajjaji Rachdi

► To cite this version:

Fatima Hajjaji Rachdi. Modélisation du comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables en fatigue pure et en fatigue-relaxation. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2015. Français. <NNT : 2015PA066324>. <tel-01347931>

HAL Id: tel-01347931

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01347931>

Submitted on 22 Jul 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

Soutenue et présentée par

Fatima Hajjaji Rachdi

Pour l'obtention du grade de :

Docteur de l'université Pierre et Marie Curie

ED SMAER

Modélisation du comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables en fatigue pure et en fatigue-relaxation

Soutenue le 20 juillet 2015 devant le jury :

Véronique Favier	Professeurs des universités, Arts et Métiers Paris Tech	Rapporteur
Bernard VIGUIER	Enseignant chercheur, CIRIMAT, ENSIACET	Rapporteur
Ladislav KUBIN	Directeur de recherches CNRS à la retraite	Examineur
Olivier CASTELNAU	Directeur de recherches, Arts et Métiers Paris Tech	Examineur
Rénald BRENNER	Chargé de recherche, UPMC-CNRS	Examineur
Maxime SAUZAY	Chercheur CEA, HDR Paris 6	Directeur

*A ma grand-mère, que Dieu te garde
Et en mémoire de Yemma, Jeddi et Baba*

*« L'ignorance mène à la peur,
La peur mène à la haine,
La haine conduit à la violence ...
Voilà l'équation. »*

Averroès (Ibn Rochd).

Remerciements

Ce manuscrit résume le travail de plus de trois ans et demi réalisé au sein du Laboratoire du Comportement Mécanique des Matériaux (LC2M) du Commissariat à l'Energie Atomique et aux Energies Alternatives de Saclay. Je remercie Luc Paradis et Philippe Chapelot son successeur ainsi que Laurence Portier et Laetitia Nicolas respectivement chefs du service SRMA et du laboratoire LC2M pour leur accueil.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux membres du jury de m'avoir fait l'honneur de juger mon travail en toute objectivité et impartialité. Je remercie les rapporteurs, Véronique Favier et Bernard Viguier pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail. Un grand merci également à Ladislav Kubin et Rénald Brenner d'avoir accepté de faire partie du jury et à Olivier Castelnau de l'avoir présidé.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse Maxime Sauzay, de m'avoir permis de mener à bout cette aventure. Je le remercie pour son encadrement, sa disponibilité, sa confiance infaillible tout au long de cette thèse. Ses conseils, son soutien et ses encouragements ont su me guider et me motiver pendant les longs moments de doute et de confusion. Ce fût un réel plaisir de travailler et de discuter avec toi.

Ce travail n'aurait pu aboutir sans l'aide précieuse de Pierre-François Giroux depuis le début de cette thèse et plus particulièrement à la fin. Merci pour ta disponibilité, ton implication et tes conseils pour l'utilisation de Sidolo et les calculs. Un grand merci à Christel Caes pour les essais à façon : fatigue, fatigue-relaxation ou encore traction avec sauts de vitesses ainsi qu'à Joel Malaplate et Thierry Vandenberghe du LA2M pour les observations MET.

Je remercie chaleureusement tous mes collègues qui ont su rendre ces trois années et demie très agréables et faciles à vivre. Merci à vous pour la bonne ambiance au quotidien, et votre soutien sans faute : Nathalie, Yiting, Khadija, Jérôme, Louis, Jean-Luc, Jean-Philippe, Pierre, Yang, Abdel, Sébastien, Murielle, Anne-Laure... ainsi qu'à tous ceux que j'aurais oubliés.

Je ne pourrais jamais assez remercier ma grande famille pour son soutien inconditionnel et son encouragement : mes parents, mes frères, ma sœur, ma belle-famille et tous ceux qui à un moment ou un autre m'ont fait part de leur soutien. Un grand merci à mon oncle Ahmed de m'avoir initié à la science depuis ma douce enfance et de m'avoir toujours soutenue et aidée tant moralement que matériellement.

Et pour terminer, je remercie mon époux, pour son amour, sa patience et sa présence toujours aussi réconfortante. Je dédie ce travail à mon petit ange, Inès, arrivée en plein milieu de cette aventure, lui donnant un sens et la rendant beaucoup plus douce.

Table des matières

Remerciements	5
Introduction générale et contexte	9
I. Caractérisation expérimentale du comportement mécanique en fatigue-relaxation de l'acier 316LN.....	13
1. Introduction.....	14
2. Méthodes expérimentales et matériau.....	15
2.1. Généralités sur les aciers inoxydables.....	15
2.2. Présentation de l'acier 316L(N).....	15
2.3. Méthodes expérimentales	17
3. Revue bibliographique.....	19
3.1. Comportement cyclique de l'acier 316L(N) à température ambiante	19
3.2. Effet de la température sur le comportement cyclique du 316LN.....	22
3.3. Vieillissement dynamique	24
3.4. Effet du temps de maintien.....	30
4. Caractérisation du comportement en fatigue-relaxation du 316L à 500°C	35
4.1. Effet du temps de maintien sur la réponse mécanique	36
4.2. Effet du temps de maintien sur la microstructure	39
4.3. Etude du vieillissement dynamique à 600°C	42
5. Discussion	44
6. Conclusions.....	46
7. Références.....	47
II. Prédiction du comportement cyclique à température ambiante des polycristaux à structure CFC : modèles à champs moyens.	49
1. Introduction.....	50
2. Description of the whole model.....	53
2.1. Effect of grain size	53
2.2. Description of the homogenization schemes.....	55
2.3. Constitutive laws and parameters adjustment	57
3. Prediction of the macroscopic cyclic behavior.....	64
3.1. Effect of secondary slip	65
3.2. Effect of single slip.....	67
3.3. Effect of grains oriented for multiple slip.....	71
4. Polycrystalline mean grain distributions	74

4.1.	Mean grain plastic strain distribution	74
4.2.	Mean grain stress distributions	82
5.	Theoretical distributions	88
6.	Discussion	90
6.1.	Effect of crystalline elasticity.....	90
6.2.	Effect of crystalline plasticity parameters	91
7.	Simulation of complex loadings and limitations of the modelling	91
7.1.	Average strain effect	92
7.2.	Strain memory effect.....	93
7.3.	Multiaxial proportional loadings	94
7.4.	Multiaxial non-proportional loadings.....	94
8.	Conclusions.....	96
9.	References	98
III.	Vers une modélisation basée sur les densités de dislocations : validation en déformation monotone à température ambiante	101
1.	Introduction.....	102
2.	Revue bibliographique.....	102
2.1.	Déformation monotone des monocristaux CFC.....	102
2.2.	Effet de la taille des grains.....	108
3.	Formulation du modèle.....	111
3.1.	Lois d'évolution des différentes populations de dislocations	111
3.2.	Loi d'écoulement.....	117
3.3.	Loi d'écrouissage :	119
4.	Identification des paramètres	120
5.	Critère de séparation des grains selon l'orientation cristalline	127
6.	Résultats : prédiction des courbes monotones macroscopiques à température ambiante	130
7.	Conclusion	137
8.	Références	138
IV.	Prédiction du comportement elasto-visco-plastique de l'acier 316LN en fatigue-relaxation à haute température	141
1.	Introduction.....	142
2.	Description de la restauration durant la phase relaxation	143
2.1.	Mécanisme de montée des dislocations	143
2.2.	Loi d'évolution des dipôles.....	145
2.3.	Prédiction du temps critique pour homogénéisation de la microstructure	147

3.	Modélisation du vieillissement dynamique	155
3.1.	Synthèse bibliographique	155
4.	Schémas d'homogénéisation en elasto-visco-plasticité.....	165
4.1.	Description des modèles d'homogénéisation adoptés	166
4.2.	Validation des modèles d'homogénéisation à champs moyen avec les calculs par EFs .	167
5.	Conclusions.....	174
6.	Références	175
V.	Modèle polycristallin en fatigue-relaxation	177
1.	Introduction.....	178
2.	Description du modèle (récapitulatif)	178
3.	Identification des paramètres	180
3.1.	Paramètres physiques et expérimentaux :.....	180
3.2.	Identification des paramètres V, Q et f :	182
4.	Résultats	186
4.1.	Relaxation	186
4.2.	Fluage	193
4.3.	Fatigue-relaxation.....	194
5.	Conclusion	202
6.	Références.....	203
	Conclusions générales et perspectives.....	204

Introduction générale et contexte

Afin de répondre à une demande énergétique qui ne cesse de croître et dans l'optique de renouveler le parc des réacteurs nucléaires qui fournissent de l'ordre de 75% de la production électrique en France, il est devenu indispensable d'orienter la recherche nucléaire vers le développement de nouveaux concepts encore plus performants. Ces « réacteurs du futur » doivent en priorité apporter plus de sûreté et de fiabilité au nucléaire ainsi qu'une résistance améliorée à la prolifération et aux agressions externes. Ces nouveaux réacteurs doivent également permettre une utilisation plus optimale des ressources naturelles et une réduction des déchets, être économiquement plus compétitifs que ce soit en termes de coûts de construction ou d'exploitation.

Afin de proposer des solutions et des technologies innovantes à ces nouveaux besoins, le Forum International Génération IV a été lancé en 2001. Ce forum rassemble 12 pays, dont la France, et a pour mission de sélectionner et de développer les solutions répondant aux différents critères déjà cités. Dans ce cadre, de nombreux concepts de réacteurs nucléaires du futur ont été retenus par le forum, parmi eux deux systèmes ont reçu le plus d'intérêt de la part du CEA et d'AREVA : il s'agit de deux de réacteurs à neutrons rapides (RNR), le premier est refroidi au sodium, le deuxième est refroidi au gaz. Deux prototypes de réacteur nucléaire à neutrons rapides et à caloporteur sodium ont déjà été construits en France: Phénix qui a été arrêté définitivement en 2010 et Superphénix qui est en cours de démantèlement depuis 2007. Un nouveau prototype de ce type de réacteur est actuellement porté par le CEA, le réacteur ASTRID, qui permettra probablement de relancer la filière des réacteurs du futur.

Dans les conditions en service prévues pour les réacteurs de génération IV à caloporteur de sodium, certains composants seront amenés à fonctionner à des températures élevées, de l'ordre de 550°C, et à subir des variations de température induisant un mode d'endommagement relativement complexe : fatigue thermique et/ou mécanique, fatigue-relaxation/fluage...etc. Une compréhension et une maîtrise des différents mécanismes de déformation et d'endommagement à l'œuvre et de leur éventuelle synergie est donc indispensable à un dimensionnement des composants de ces réacteurs garantissant leur intégrité.

Les aciers austénitiques inoxydables, et notamment l'acier 316L(N), ont déjà été utilisés comme matériaux de référence pour la plupart des composants internes de la cuve des deux réacteurs expérimentaux Phénix et Superphénix. Ils demeurent des candidats potentiels pour les composants des circuits des futurs réacteurs à neutrons rapides à caloporteur de sodium (Génération IV). Ces composants sont conçus pour fonctionner à hautes températures (500-600°C) et seront soumis à des

sollicitations cycliques induisant un endommagement de fatigue dans le matériau. Les phases de chargement-déchargement incluent de longs maintiens, de l'ordre d'un mois, à haute température provoquant une relaxation due aux phénomènes de viscoplasticité (fluage, relaxation) et de diffusion de lacunes. L'interaction de ces différents mécanismes rend complexe une modélisation du comportement mécanique et une prédiction de la durée de vie du matériau prenant en compte les différents processus d'endommagement.

Pour ces composants sollicités en fatigue-fluage à haute température, l'interaction des deux modes de sollicitation fatigue et fluage induit une réduction de la durée de vie qui reste à évaluer pour de faibles déformations et de longs temps de maintien. De nombreuses études expérimentales ont été menées, visant à comprendre l'effet combiné des chargements de fatigue incluant des périodes de maintien plus ou moins longues. Les sollicitations en services sont représentées par des essais de fatigue oligocyclique incluant des temps de maintien en traction ou en compression [(Wood et al., 1980), (Mottot et al., 1982), Ermi et Moteff, 1982), (Cailletaud et al., 1984), (Levaillant et al., 1988), (Sauzay et al., 2004)). Un nombre important de résultats expérimentaux en fatigue-relaxation et en fatigue-fluage ont alors été obtenus sur l'acier 316L(N) pour des températures comprises entre 550°C et 600°C.

Il est à noter que les temps de maintien en service sont relativement longs (de l'ordre d'un mois) et inaccessibles en laboratoire. Les essais de fatigue-relaxation (ou fluage) menés jusqu'à ce jour se réfèrent à des temps de maintien de l'ordre de 1h, et au mieux de l'ordre de 1 jour pour les essais dédiés réalisés dans le cadre du présent travail. Ces temps de maintien demeurent largement en dessous de ceux rencontrés en service, d'où la nécessité de s'orienter vers une modélisation physique permettant d'explorer des temps de maintien suffisamment longs.

L'objectif de cette étude est donc de proposer des modèles de comportement mécanique qui reproduisent les différents mécanismes physiques observés expérimentalement. La démarche de la présente étude consiste en cinq grandes étapes, correspondants aux cinq chapitres du manuscrit :

- Dans un premier temps, une étude expérimentale a été menée concernant le comportement en fatigue-relaxation de l'acier 316L(N) à 500°C. Le but a été d'élargir le domaine de température investigué, de mieux comprendre l'effet de la température et de distinguer les différents mécanismes activés pendant ces chargements. De plus, des essais de traction à 600°C ont également été réalisés à différentes vitesses de chargement afin d'étudier le

phénomène du vieillissement dynamique et de fournir des données expérimentales nécessaires à l'identification de certains paramètres du modèle.

- Dans le second chapitre, nous nous sommes intéressés à la modélisation du comportement mécanique en fatigue pure et à température ambiante, de différents métaux et alliages de structure cubique à faces centrées dont l'acier 316L(N). L'homogénéisation polycristalline a été utilisée afin de prédire le comportement microscopique et macroscopique du matériau à partir des lois identifiées et validées à l'échelle du monocristal. L'objectif a été de valider l'approche multi-échelle pour un chargement relativement simple avant de s'atteler aux problématiques plus complexes liées aux chargements de fatigue-relaxation/fluage à haute température.
- Le troisième chapitre du manuscrit est consacré à une modélisation plus physique des mécanismes de déformation avec l'utilisation de lois basées sur les densités de dislocations. Le modèle ne fait appel à aucun paramètre ajustable sur des courbes expérimentales macroscopiques. Les différents paramètres du modèle ont été identifiés à partir de courbes monocristallines expérimentales et un critère a été proposé permettant de prendre en compte la dépendance du comportement du monocristal/grain vis-à-vis de son orientation cristallographique. Une validation qualitative du modèle a été effectuée pour différents matériaux CFC en traction monotone à température ambiante en utilisant deux approches d'homogénéisation à champs moyen.
- Dans le quatrième chapitre, les mécanismes régissant le comportement du matériau à haute température et durant le maintien ont été introduits. Ces mécanismes concernent principalement l'annihilation des dipôles de dislocations par montée, les interactions entre les dislocations mobiles et les nuages d'impuretés induisant un phénomène du vieillissement dynamique ainsi que la viscosité. Différents modèles simplifiés basés sur la montée des dislocations ont été utilisés afin de prédire le temps de maintien critique, nécessaire pour ne pas faire apparaître les structures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure. Enfin, une approche numérique a été réalisée afin de valider l'approche d'homogénéisation à champ moyen grâce à des calculs par éléments finis multicristallins.
- Le chapitre cinq est consacré à l'identification des paramètres du modèle de viscoplasticité cristalline à haute température, incluant l'ensemble des mécanismes identifiés pour des

chargements de fatigue-relaxation. Les résultats des simulations en traction, relaxation, fluage et en fatigue-relaxation, fournies par le modèle à champ moyen, validé dans le précédent chapitre, sont décrits et comparés aux courbes expérimentales.

- Enfin, une conclusion générale reprend les principaux résultats de ce travail et décrit quelques perspectives de travaux à mener dans le futur.

I. Caractérisation expérimentale du comportement mécanique en fatigue-relaxation de l'acier 316LN

1. Introduction

Les aciers austénitiques inoxydables de type AISI 316L et AISI 316L(N) sont largement utilisés dans le milieu industriel et notamment dans des applications à haute température. Leurs bonnes propriétés mécaniques ainsi que leur résistance à la corrosion font de ces alliages des candidats potentiels pour des composants de circuits dans les Réacteurs à Neutrons Rapides (RNR). Dans les conditions de fonctionnement à haute température prévues pour ces réacteurs, ces composants seront soumis à des chargements cycliques incluant une mise en charge, un maintien en charge pour de longues durées (de l'ordre d'un mois) et une décharge. Ces cycles se caractérisent par une interaction complexe entre différents mécanismes (fatigue-relaxation ou fatigue-fluage) dont la compréhension est nécessaire afin de décrire le comportement des matériaux utilisés dans des conditions aussi sévères.

Avec le développement des RNR, un grand nombre d'études expérimentales et théoriques ont été menées afin de caractériser le comportement de ces matériaux en fatigue-fluage et en fatigue-relaxation [(Wood et al., 1980), (Mottot et al., 1982), (Cailletaud et al., 1984), (Levaillant et al., 1988), (Sauzay et al., 2004), (Gentet, 2009), (Catalao, 2005)]. Ces études mettent en évidence un fort effet du temps de maintien sur le comportement cyclique induisant une synergie et/ou compétition entre des mécanismes d'écrouissage et de relaxation et/ou restauration pendant le maintien. Ces interactions impactent les mécanismes d'endommagement et induisent une forte réduction du nombre de cycles à rupture par rapport à la fatigue pure.

Ce chapitre se compose d'une partie bibliographique consacrée à la présentation du matériau de l'étude (316LN) et à une synthèse des différents travaux entrepris afin de caractériser le comportement mécanique et microstructural des aciers 316L et 316L(N) en fatigue pure à température ambiante et à haute température ainsi qu'en fatigue-relaxation (à haute température).

Ensuite, les nouveaux résultats de l'étude du comportement de l'acier 316L(N) à 500°C en fatigue pure et en fatigue-relaxation sont présentés. Les essais ont été menés à amplitude de déformation totale imposée (0.3%) et à une vitesse de déformation totale de 2.10^{-3} s^{-1} . Deux temps de maintien en traction ont été étudiés : 10h et 50h. L'effet de ces temps de maintien beaucoup plus longs que ceux habituellement appliqués dans la littérature est discuté aussi bien sur le comportement mécanique que sur l'évolution des structures de dislocations.

Les nouveaux résultats de l'étude du phénomène du vieillissement dynamique à 600°C sont également présentés. Les essais de tractions ont été entrepris à différentes vitesses de déformation totales imposée variant entre 2.10^{-3} s^{-1} et 2.10^{-8} s^{-1} .

Enfin, les interactions entre les différents mécanismes caractéristiques de la fatigue-relaxation sont discutées ainsi que leurs liens avec le comportement macroscopique et microstructural du matériau. L'identification et la compréhension de ces mécanismes constituent une étape clé de ce travail dont le but est de proposer un modèle physique capable de prédire le comportement du matériau dans les conditions en service, inaccessibles en laboratoire.

2. Méthodes expérimentales et matériau

2.1. Généralités sur les aciers inoxydables

Les aciers inoxydables sont des alliages fer-carbone contenant au minimum 12% de chrome et au maximum 1.2% de carbone. Les premières nuances d'acier à bas carbone allié au chrome ont été développées au début du XX^{ème} siècle en Europe et aux USA (Goldschmidt, Guillet (1904), Portevin (1909), Chevenard (1929)). La faible teneur en carbone évite la précipitation des carbures et l'enrichissement en chrome permet à ces aciers de développer une couche fine d'oxyde de chrome en surface. Appelée aussi couche de passivation, elle confère aux aciers inoxydables une meilleure résistance à la corrosion, d'où leur nom « aciers inoxydables ».

Les aciers inoxydables sont nombreux ainsi que leurs domaines d'applications. On les classe toutefois en quatre grandes catégories, selon leur composition chimique et leur structure cristallographique.

- ✓ Les aciers ferritiques
- ✓ Les aciers austénitiques
- ✓ Les aciers martensitiques
- ✓ Les aciers austéno-ferritiques

Le matériau étudié fait partie des aciers inoxydables austénitiques. Ce sont des aciers contenant du chrome (couramment 18 %) et du nickel (couramment de 8 à 10 %) dont la structure est austénitique (phase γ) à température ambiante. Ils se caractérisent par une grande aptitude à la déformation, une très bonne soudabilité et une résistance à la corrosion très satisfaisante et ce dans différents milieux. Leur stabilité structurale permet leur utilisation aussi bien à hautes températures (échangeurs de chaleur) qu'aux basses températures (stockage de gaz liquéfié).

2.2. Présentation de l'acier 316L(N)

Le matériau utilisé dans cette étude est l'acier AISI 316L(N) (désignation américaine). Il s'agit d'un acier inoxydable austénitique de structure cubique à faces centrées. La lettre « L » désigne une faible teneur en carbone (Low Carbon) et la lettre « N » une teneur en azote contrôlée (Nitrogen). Il provient d'une tôle référencée SQ fournie par EDF. La tôle a été élaborée au four électrique puis affinée en poche sous vide. Après un maintien de 90 min à 1100°C afin de favoriser la formation de l'austénite, la tôle a subi une hypertrempe à l'eau permettant de conserver les éléments d'addition en solution solide.

2.2.1. Composition chimique

La composition chimique ainsi que les teneurs tolérées sont présentés dans le tableau TAB.I-1.

Le chrome est l'élément d'addition le plus important. Il confère à l'acier une résistance à la corrosion au-delà d'une teneur massique de 12%, qui s'améliore en augmentant la teneur en chrome. Le

chrome est également reconnu comme étant un élément α -gène, favorisant la formation et la stabilité de la phase ferritique (phase α).

La présence du carbone est largement réduite dans l'acier 316L(N) afin de limiter la précipitation des carbures de chrome (Cr_7C_3 et Cr_{23}C_6) aux joints de grain. Cette précipitation induit une « déchromisation » locale de l'austénite et diminue la résistance de l'acier à la corrosion intergranulaire. Le carbone est un élément gammagène, son addition stabilise la formation de l'austénite et ce jusqu'à des teneurs de 20% en chrome.

Le nickel est reconnu pour son rôle de stabilisateur de l'austénite. Il permet également d'améliorer la résistance à la corrosion acide ainsi que la formabilité de l'acier.

Le molybdène permet de renforcer l'action du chrome en augmentant la stabilité de la couche de passivation. Il améliore la résistance à la corrosion dans la plupart des milieux corrosifs, en particulier dans les milieux chlorés, phosphorés ou encore soufrés. Le molybdène est un élément gammagène.

L'addition contrôlée de l'azote permet de pallier aux effets liés à la réduction de la teneur en carbone (réduction de la dureté du matériau). L'azote est un élément fortement gammagène. Il permet de stabiliser les propriétés mécaniques de l'alliage et augmente sa résistance à la corrosion par piqûres, à la corrosion intergranulaire ainsi qu'à la fissuration sous contrainte.

	C	S	P	Si	Mn	Ni	Cr	Mo	N	B	Co	Cu
Min	0.000	0.000	0.000	0.00	1.60	12.00	17.00	2.30	0.060	0.0000	0.00	0.00
Max	0.030	0.025	0.035	0.50	2.00	12.50	18.00	2.70	0.080	0.0020	0.25	1.00
SQ	0.030	0.001	0.021	0.40	1.84	12.3	17.5	2.47	0.075	0.0011	0.14	0.175

TAB.I-1 : Composition chimique de l'acier 316L(N) SQ en % massique et les compositions chimiques minimum et maximum recommandées par le RCC-MR (AFCEN, 2002)

2.2.2. Microstructure

Les caractéristiques microstructurales de l'acier dépendent fortement des nuances et des coulées. Pour le cas de l'acier de cette étude, on se réfère aux mesures de Gaudin (2002) réalisées sur la même tôle (SQ). La valeur moyenne de la taille de grains mesurée est de l'ordre de $53\mu\text{m}$ (FIG.I-1). Cette valeur correspond également à des mesures réalisées sur d'autres tôles (AVESTA, Gentet (2009)). De plus, selon les figures de pôles obtenues par imagerie EBSD (Gaudin, 2002), le matériau ne semble pas présenter une texture particulière.

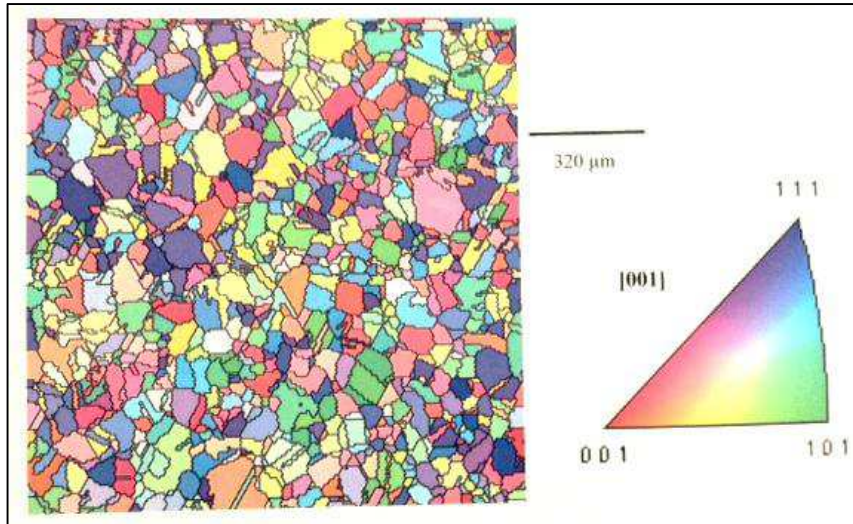


FIG. I-1: Microstructure du 316L(N) obtenue par imagerie EBSD (Gaudin, 2002)

A température ambiante et à l'état vierge de déformation, les observations en microscopie électronique en transmission (MET) révèlent une densité de dislocations initiale de l'ordre de $10^{10} m^{-2}$ (Gaudin, 2002). Une densité initiale plus importante a été mesurée par Gentet (2009) sur une tôle Avesta ; de l'ordre de $3.4 \cdot 10^{12} m^{-2}$. Dans la suite de ce travail et notamment dans la partie simulation numérique, la densité de dislocations initiale sera prise entre 10^{10} et $10^{12} m^{-2}$.

2.3. Méthodes expérimentales

2.3.1. Essais mécaniques

Les essais de fatigue oligocyclique continue et avec temps de maintien menés dans le cadre de cette étude ont été réalisés à l'aide d'une machine de traction-compression de la marque MAYES (ESM100, FIG.I-2). La machine est de type électromécanique, de capacité +/- 100kN et est asservie en déformation.

L'ensemble de ces essais ont été réalisés sur des éprouvettes cylindriques (cf. FIG.I-3). Elles présentent une partie cylindrique calibrée de 16 mm de longueur et de 8 mm de diamètre.

L'asservissement en déformation est assuré par un extensomètre capacitif de 10 mm de base de mesure, fixé directement sur la partie calibrée de l'éprouvette avec une étendue de mesure jusqu'à +/-0.25mm, de l'ambiante à 700°C. Le chauffage est assuré par un four à résistance.

La machine permet de réaliser différents types d'essais, et ce dans un domaine de température variant entre l'ambiante et 700°C :

- Fatigue oligocyclique avec temps de maintien en relaxation ou en fluage.
- Essai de symétrisation sous sollicitation répétée ou ondulée.
- Essais à façon : traction monotone, cyclage, fluage, relaxation.

Les essais de fatigue pure et de fatigue avec temps de maintien ont été menés à une température de 500°C.

Les essais de traction monotone à 600°C à différentes vitesses de déformation et avec sauts de vitesse ont été conduits sur la même machine. Ces essais nous ont permis d'étudier le phénomène du vieillissement dynamique.

L'ensemble de ces essais a été réalisé avec la précieuse aide de C. CAES.



FIG. I-2: la machine MAYES ESM100 utilisée pour les essais

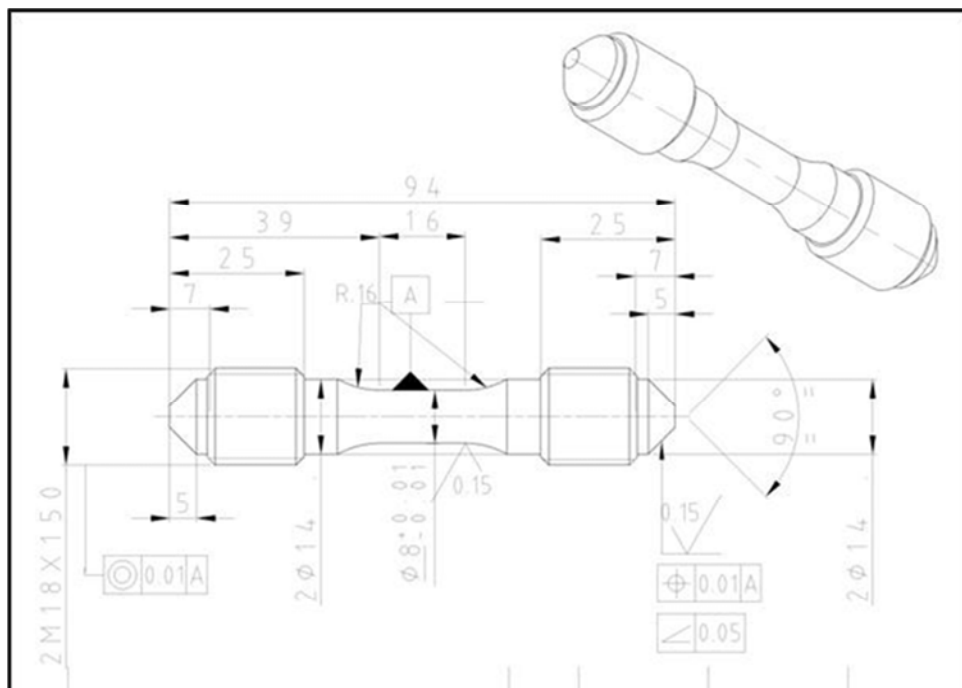


FIG. I-3: Eprouvette de fatigue oligocyclique FFL2 MOD2

2.3.2. Observations MET

Les observations des microstructures de dislocations formées en fatigue pure et en fatigue-relaxation ont été menées à l'aide d'un microscope électronique en transmission (MET) JEOL 2100 ayant une tension d'accélération de 200 kV.

Dans cette étude, des échantillons ont été prélevés sur la partie cylindrique de l'éprouvette après sollicitation, dans le sens longitudinal de l'éprouvette (ie parallèlement à l'axe de la sollicitation). Des lames de 3 mm de diamètre et de 100µm d'épaisseur ont été obtenues par polissage mécanique. Les disques ont ensuite subi un polissage électrochimique dans un appareil de type Tenupol à jets. L'attaque s'est produite dans une solution contenant 70% d'éthanol, 20% d'éther monobutylique d'éthylène glycol et 10% d'acide perchlorique jusqu'à formation d'un trou dans l'échantillon.

Les observations MET ont été menées avec l'aide de J. Malaplate et de T. Vandenberghe (SRMA/LA2M).

3. Revue bibliographique

3.1. Comportement cyclique de l'acier 316L(N) à température ambiante

L'acier 316L(N) fait partie des matériaux qui, lorsqu'ils sont soumis à des sollicitations cycliques, présentent un durcissement cyclique dès le début du cyclage. Ainsi, pour une amplitude de déformation totale (ou plastique) donnée, l'amplitude de la contrainte augmente avec le nombre de cycles. Ce durcissement est suivi par un léger adoucissement et un stade de saturation durant lequel l'amplitude de la contrainte n'évolue quasiment pas avec l'augmentation du nombre de cycles ([Polak et al., 1994], [Pham et al., 2013]), FIG.I-4. Le cuivre polycristallin présente des courbes cycliques relativement similaires à celles de l'acier 316L (et l'acier 316L(N)) (Polak et al., 1992) tandis que le nickel se distingue par l'absence du stade d'adoucissement (Haddou, 2003).

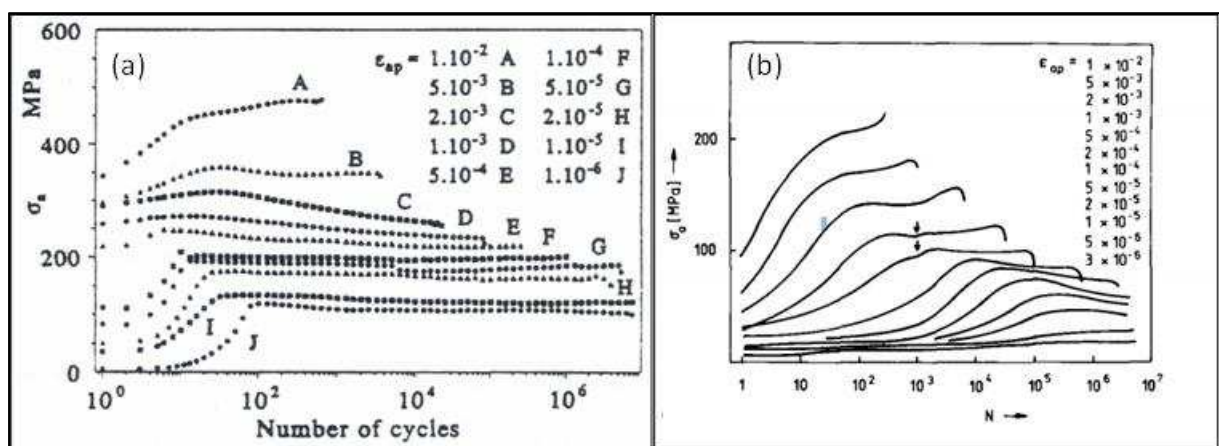


FIG. I-4: Courbes cycliques à température ambiante(a) pour l'acier 316L (Polak et al., 1994) (b) pour le cuivre polycristallin (Polak et al., 1992)

La courbe d'écrouissage cyclique de l'acier 316L(N) est présentée sur la figure FIG.I-5 (Gaudin, 2002). Les points expérimentaux proviennent de différentes études réalisées sur le même matériau à température ambiante. La courbe de traction est également présentée pour comparaison. Pour des amplitudes de déformation plastique inférieures à 4.10^{-3} , les deux courbes se superposent. Au-delà de cette valeur, l'écrouissage cyclique devient plus important que celui atteint en déformation monotone. A l'instar de la traction monotone, différents stades correspondant à différents mécanismes de déformation peuvent être observés sur la courbe d'écrouissage cyclique de l'acier 316L (ou 316L(N)) (FIG.I-5). Ainsi, en plus des quatre stades identifiés en chargement monotone par Feaugas (1999), Gaudin (2002) identifie deux nouveaux stades propres à la sollicitation cyclique, notés stades II₀ et III₀.

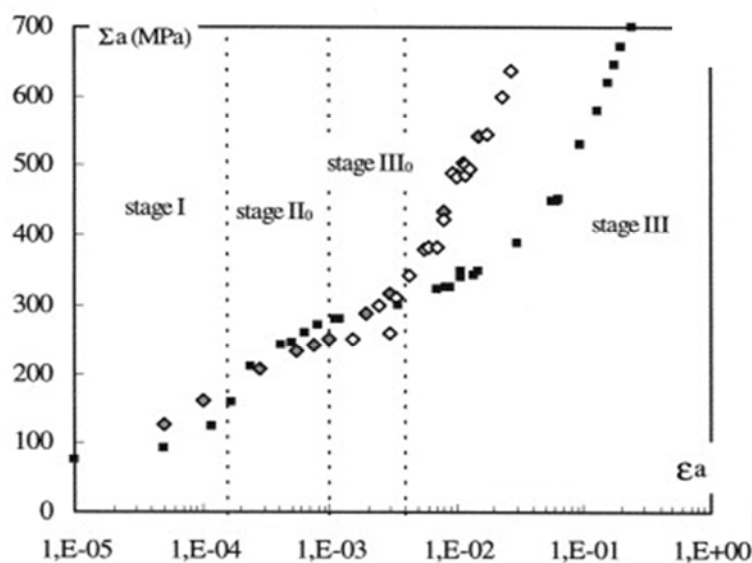


FIG. I-5: Courbe d'écrouissage cyclique pour l'acier 316L (losanges), la courbe de traction est représentée (carrés) pour comparaison (Gaudin, 2002)

Ces stades sont associés à des mécanismes de déformation différents et se caractérisent par la formation de structures de dislocations particulières (FIG.I-6).

Le stade I est observé aux faibles déformations plastiques. Il est caractérisé par l'activation du glissement simple et planaire dans les grains bien orientés (facteur de Schmid supérieur à 0.45). La présence d'empilements de dislocations ainsi que de fautes d'empilement révèle une grande réversibilité du glissement (Obtlik et al., 1994 ; Li and Laird, 1994a). Les structures de dislocations se développent sous forme de bandes de glissement planaires, parallèles au plan du système de glissement primaire ([Obtlik et al., 1994], [Gerland et al., 1997], [Li and Laird, 1994]). Les dislocations s'arrangent sous forme de rubans « bundles » irréguliers qui peuvent se densifier, laissant apparaître des régions pauvres en dislocations. De nombreux dipôles, multipôles ainsi que des boucles ont également été observés démontrant l'activation du glissement dévié ([Obtlik et al., 1994], [Gaudin, 2002]).

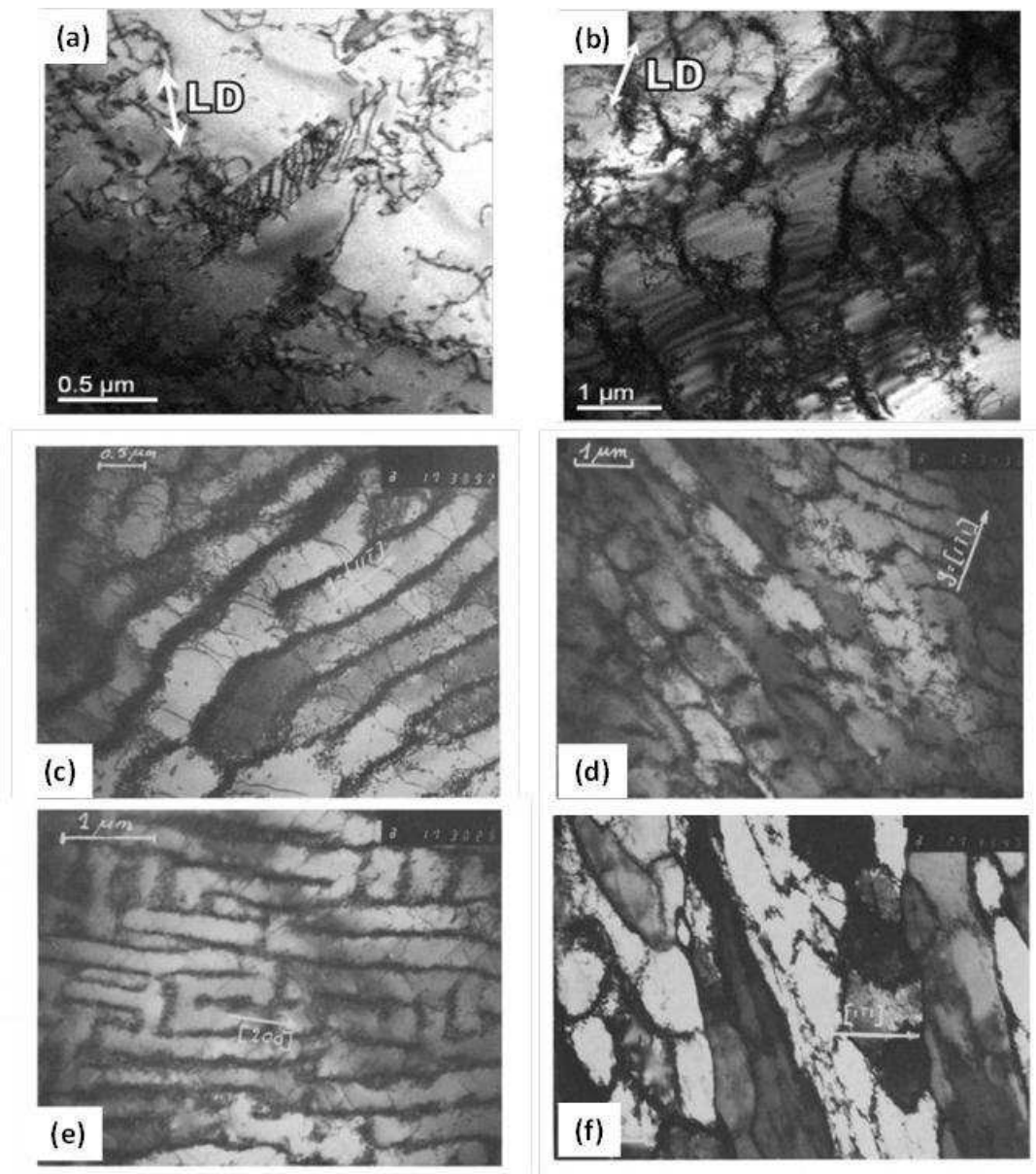


FIG. I-6: Différentes structures de dislocations observées dans un acier 316LN sous chargement cyclique à déformation imposée : (a) structures planaires (b) veines (c) murs dipolaires (d) BGPs (e) labyrinthes (f) cellules ([Gerland et al., 1989], [Pham et al., 2011a])

Au cours du stade II₀, l'augmentation de la déformation plastique favorise le glissement dévié. Les bandes de glissement planaires formées au cours du stade I se densifient et interagissent pour donner naissance à des structures de type veines. Ces structures sont constituées d'amas de dipôles ou de multipôles séparés par des chenaux contenant une faible densité de dislocations ([Obtlik et al., 1994], [Gerland et al., 1997], [Kruml et al., 1997], [Gaudin, 2002]). Ces veines s'affinent avec l'augmentation de la déformation plastique.

Le stade III₀ s'accompagne par la formation de structures en « échelle » (ladder-like) avec notamment l'apparition de bandes de glissement persistantes (BGP). Ces structures résultent de l'interaction entre les veines imparfaites et des rubans de dislocations et se présentent sous forme d'échelles qui alternent des murs denses en dislocations et des canaux (zones molles) contenant une faible densité de dislocations. Les murs sont constitués de dipôles coins ou plus précisément de boucles dipolaires (Sauzay and Kubin, 2011) tandis que les canaux sont constitués majoritairement de dislocations vis. La déformation plastique est accommodée en grande partie par le glissement des dislocations vis

dans les canaux. Des structures de type labyrinthes sont également observées au cours de ce stade. Elles résultent de l'interaction entre les BGP's et se composent de murs denses et fins et de zones pauvres en dislocations ([Obtlik et al., 1994] ; [Gerland et al., 1997] ; [Kruml et al., 1997], [Gaudin, 2002]). Elles s'observent dans des grains pour lesquels l'axe de traction est proche d'un axe $\langle 100 \rangle$ (Boulanger et al., 1985).

Enfin, le stade IV se caractérise par la formation de cellules désorientées les unes par rapport aux autres ($\pm 2^\circ$) et des macles.

L'évolution des structures de dislocations dépend également du nombre de cycles pour une amplitude de déformation donnée. La figure FIG.I-7 présente l'évolution des structures de dislocations dans l'acier 316L au cours d'un chargement cyclique à déformation totale imposée de $\pm 0.7\%$ (Pham et al., 2011b). Le stade de durcissement se caractérise par la formation de structures planaires. L'activation du glissement dévié et du glissement secondaire durant le stade d'adoucissement permet un réarrangement des dislocations formant ainsi des murs et des canaux. Avec l'augmentation du nombre de cycles, des cellules et des labyrinthes apparaissent. Les bandes de glissement persistantes sont également observées et sont très actives durant le stade de saturation.

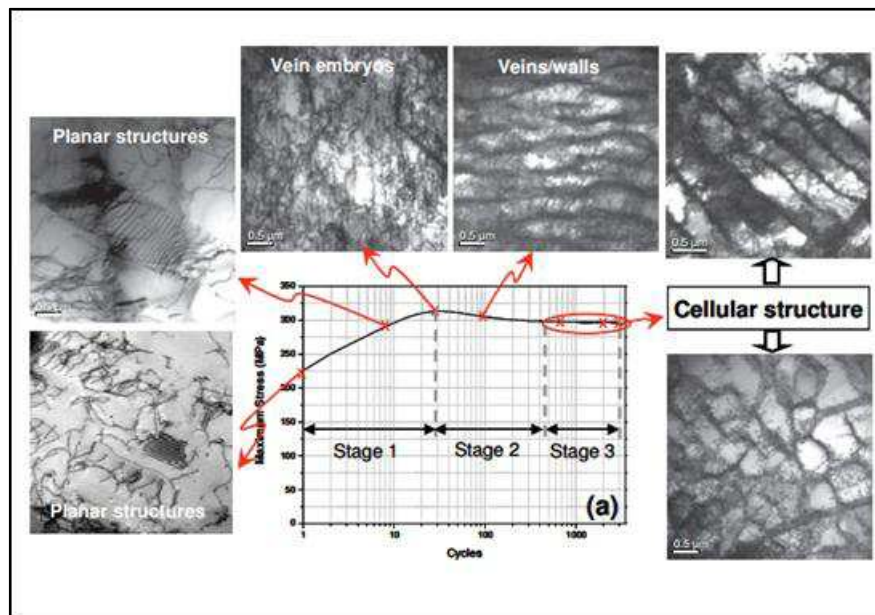


FIG. I-7: évolution des structures de dislocation en fonction du nombre de cycles (Pham et al., 2011b)

3.2. Effet de la température sur le comportement cyclique du 316LN

En fatigue, la température est un facteur clé qui peut affecter aussi bien la réponse cyclique macroscopique du matériau que les mécanismes de déformation associés. Le domaine de températures entre 20°C et 600°C a été étudié en détail par Alain et al. (1997) et Gerland et al. (1997) pour l'acier 316L. Srinivasan et al. (1991) et Gentet (2009) se sont également intéressés à

l'influence des hautes températures sur l'écrouissage cyclique de l'acier 316L(N). Les courbes cycliques obtenues par ces auteurs sont présentées sur la figure FIG.I-8.

L'analyse des courbes cycliques a permis d'identifier différents stades d'écrouissage dont la présence et l'intensité dépendent fortement de la température (pour une amplitude de déformation donnée) (Alain et al., 1997). Le stade du durcissement primaire est observé indépendamment de la température (FIG.I-8). Toutefois, le taux d'écrouissage au cours de ce stade augmente avec la température ainsi que le nombre de cycles nécessaire pour atteindre la fin du durcissement ([Gentet, 2009] et [Alain et al., 1997]). La contrainte maximale atteinte à la fin de ce stade diminue entre 20°C et 300°C puis croît jusqu'à 600°C (Alain et al., 1997).

Le stade de durcissement est suivi par une phase plus lente d'adoucissement et ce, quelle que soit la température. La durée de ce stade décroît avec l'augmentation de la température. La fin de l'adoucissement s'accompagne par l'apparition d'un stade d'écrouissage secondaire pour les températures intermédiaires (entre 200 et 500°C) tandis qu'un plateau de saturation s'installe pour les températures de 20 et 600°C.

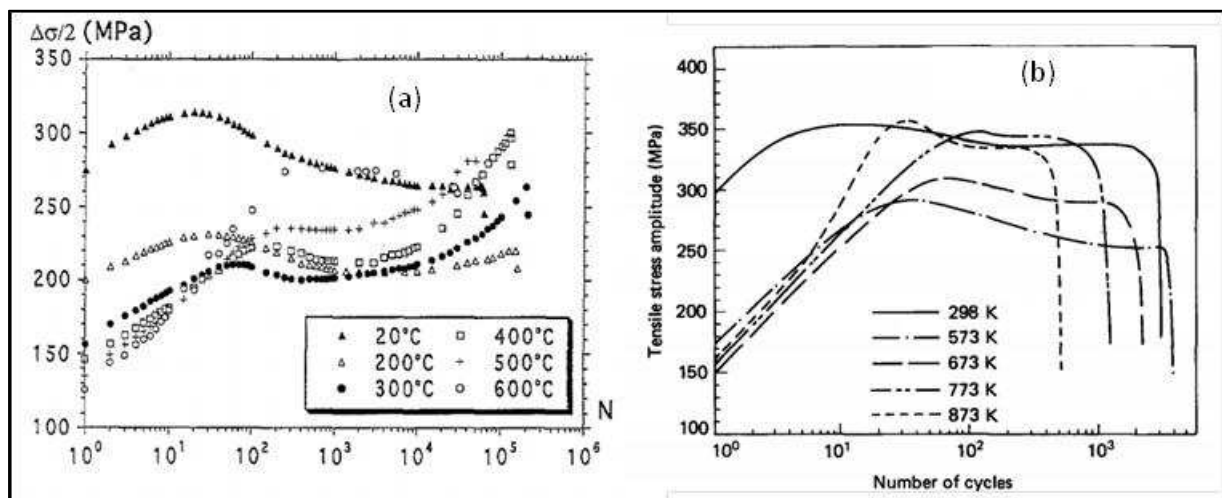


FIG. I-8: effet de la température sur l'évolution de la contrainte cyclique en fonction du nombre de cycles : (a) 316LN, $\frac{\Delta\epsilon_p}{2} = \pm 2 \times 10^{-3}$ (Alain et al., 1997) (b) 316L(N), $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = \pm 6 \times 10^{-3}$ (Srinivasan et al., 1991)

L'observation des structures de dislocations révèle également un fort effet de la température. Pour des températures situées entre 20 et 200°C, les structures observées révèlent l'activation du glissement dévié avec la formation de veines, de BGPs, de labyrinthes et en grande partie de cellules. Les cellules sont moins nombreuses et relativement plus « lâches » à 200°C qu'à température ambiante mais sont bien présentes (Gerlant et al., 1997).

Pour des températures intermédiaires, les structures usuelles de la fatigue disparaissent donnant naissance à une nouvelle structure à caractère planaire, appelée Corduroy (FIG.I-9, Gerlant et al. 1997). Cette structure se compose de murs denses allongés sur les plans $\{111\}$, séparés par des canaux. Les murs sont constitués essentiellement de petites boucles de dislocations, de débris et de petites cavités. La structure Corduroy ne se forme pas dès le début du chargement. Elle résulte de la

fragmentation de dislocations et de la destruction des structures formées auparavant. La structure Corduroy semble être à l'origine du durcissement secondaire observé pour les températures intermédiaires et son caractère planaire a été associé au vieillissement dynamique, résultant de l'interaction entre les dislocations et les atomes de solutés C et N (Gerland et al., 1997).

Enfin, pour des températures supérieures à 600°C, le glissement dévié est favorisé et les structures de types cellules sont prédominantes.



FIG. I-9: Structure de Corduroy formée dans l'acier 316L à 400°C, $\frac{\Delta \epsilon_p}{2} = 2 \times 10^{-3}$ (Gerland et al., 1997)

3.3. Vieillissement dynamique

Le vieillissement dynamique (DSA pour Dynamic Strain Ageing) est associé à l'interaction entre les dislocations mobiles et les atomes de soluté [(Cottrel, 1953), (Sleeswyk, 1958), (Van Den Beukel, 1980), (McCormick, 1972)]. Il dépend essentiellement de la vitesse de déformation et de la température qui gouvernent la mobilité des dislocations ainsi que la diffusion des éléments en solution solide. Le vieillissement dynamique se produit durant la sollicitation mécanique. Il est à différencier du vieillissement statique qui, bien qu'il soit lié au même mécanisme que le DSA (interaction dislocation-soluté), se produit en l'absence de chargement mécanique [(Strudel, 1979), (Blanc, 1986)].

Dans des conditions de température et de vitesse de déformation favorisant le vieillissement dynamique, la mobilité des atomes de soluté est suffisante pour gêner le mouvement des dislocations. En effet, lors de leurs mouvements, les dislocations mobiles rencontrent des obstacles, souvent de type arbres de la forêt. Ces dislocations se retrouvent alors bloquées pendant un certain temps (temps d'attente). Durant cette période, les atomes de soluté dont la mobilité est suffisante diffusent le long des lignes de dislocation et forment un nuage (ou atmosphère) d'impuretés autour du point d'ancrage (FIG.I-10). Par conséquent la force d'ancrage des dislocations mobiles augmente et une contrainte supplémentaire est nécessaire afin de les libérer de ces obstacles et de les remettre en mouvement. Ce phénomène se manifeste, aussi bien lors de chargements monotones qu'en sollicitations cycliques, par l'apparition d'anomalies et d'instabilités dans la réponse macroscopique du matériau.

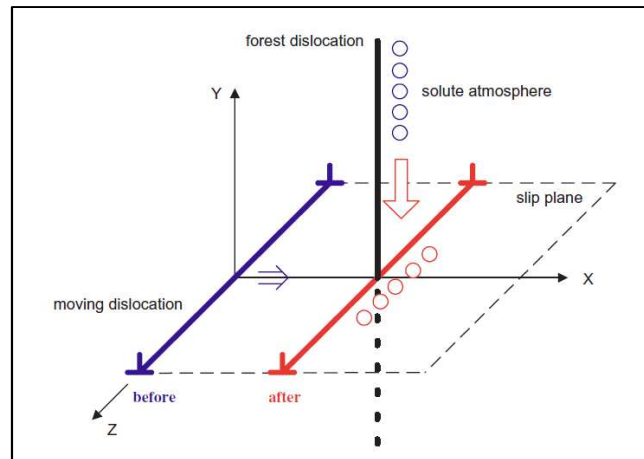


FIG. I-10: Mécanismes du vieillissement dynamique (Hong and Lee, 2005)

3.3.1. Traction monotone

En traction monotone, le vieillissement dynamique se manifeste essentiellement par l'apparition d'irrégularités ou de serrations sur les courbes contrainte-déformation (effet Portevin-Le Chatelier). Ces serrations apparaissent sous forme de décrochements répétés ou de paliers successifs selon que l'essai est réalisé à vitesse de déformation ou de contrainte imposée (Blanc, 1986). La figure FIG.I-11 illustre le phénomène Portevin-Le Chatelier (PLC) pour un acier 316L(N) et pour un acier 316L préalablement écroui à froid. La forme et l'intensité des décrochements dépendent fortement de la température et n'apparaissent, pour une vitesse de déformation prédéfinie, que dans un domaine de température limité (773-923K pour « CW 316L »). Le domaine d'existence du phénomène PLC dépend aussi bien de la vitesse de déformation que de la température. Choudhary (2014) a établi une carte vitesse de déformation-température-serrations pour l'acier 316L(N). On y distingue un domaine d'existence du phénomène PLC caractérisé par la présence de serrations. Les mesures de l'énergie d'activation (les droites (a)-(e) FIG.I-12) associée à l'apparition des instabilités mettent en évidence deux régimes de DSA : un régime de basses températures ($Q \approx 115 \text{ KJ.mol}^{-1}$) et un régime de hautes températures ($Q \approx 208 \text{ KJ.mol}^{-1}$). Une carte similaire a été réalisée par Samuel et al. (1988) pour un acier 316L, donnant des énergies de mêmes ordres de grandeur. En comparant ces énergies d'activation aux énergies de diffusion de certains éléments d'alliage de l'acier 316L(N), ces auteurs ont constaté que l'énergie d'activation associée au régime des basses températures est proche des énergies de diffusion du carbone et de l'azote dans l'austénite (atomes interstitiels). Quant à l'énergie d'activation du domaine des hautes températures, elle est du même ordre de grandeur que l'énergie de diffusion du chrome (atome en substitution).

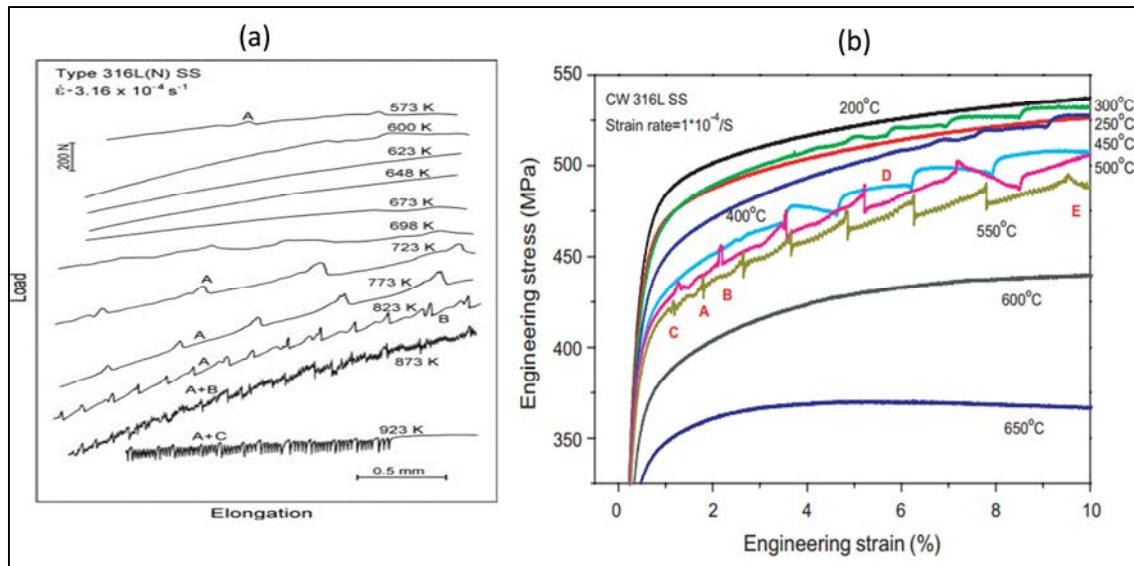


FIG. I-11: Illustration de l'effet Portevin-Le Chatelier (a) acier 316L(N) (Choudhary, 2014) (b) acier 316L pré-déformé à froid (Hong and Lee, 2004). Pilotage en déformation.

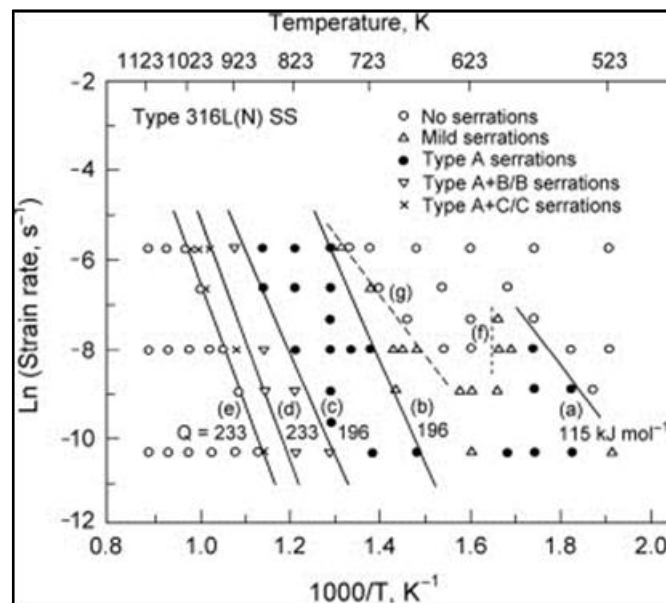


FIG. I-12: domaine de présence de serrations pour un acier 316L(N) (Choudhary, 2014).

Outre l'apparition d'instabilités sur les courbes macroscopiques, le PLC se manifeste par une sensibilité négative à la vitesse de déformation ($SRS < 0$). Ainsi, lorsque la vitesse de déformation imposée augmente, la contrainte diminue. La figure FIG.I-13 illustre cet effet pour un acier 316L (Gaudin, 2002). Cet effet est lié à la dynamique d'ancrage des dislocations par des nuages d'impuretés, formés par les atomes de solutés ayant diffusé. Considérant deux vitesses $\dot{\epsilon}_1 < \dot{\epsilon}_2$: pour une sollicitation à la vitesse $\dot{\epsilon}_1$, le temps d'attente d'une dislocation bloquée par des arbres de

forêt est plus important que pour une sollicitation à la vitesse $\dot{\epsilon}_2$. La quantité des atomes ségrégés autour du point d'ancrage est en fait plus importante et la contrainte nécessaire pour libérer la dislocation de son nuage sera donc plus élevée à la vitesse $\dot{\epsilon}_1$ qu'à la vitesse $\dot{\epsilon}_2 > \dot{\epsilon}_1$.

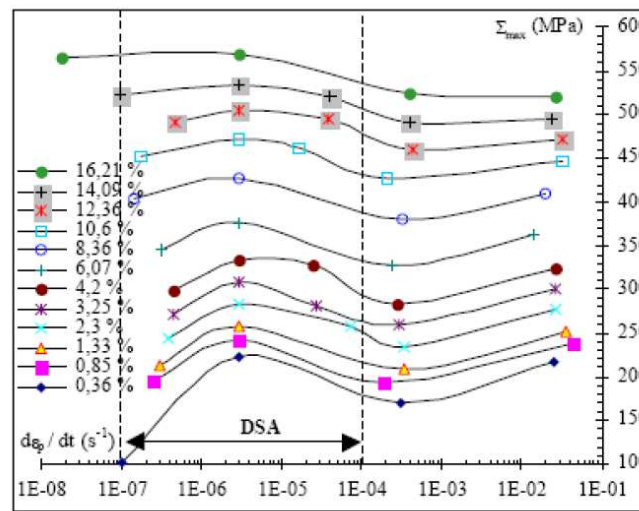


FIG. I-13: Evolution de la contrainte en fonction de la vitesse de déformation à 623K pour un acier 316L en traction monotone (Gaudin, 2002)

3.3.2. Chargement cyclique

Le vieillissement dynamique se manifeste également lors de sollicitations cycliques suivant les mêmes mécanismes mis en évidence en traction monotone, en lien avec la dynamique des interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de soluté. Toutefois les anomalies liées au DSA en sollicitation cyclique sont quelque peu différentes de celles décrites auparavant dans le cadre du chargement monotone. Plusieurs études mettent en évidence la présence de serrations sur les boucles d'hystérésis des aciers 316L et 316L(N) [(Srinivasan et al., 1999), (Mannan, 1993), (Pham and Holdsworth, 2012)], FIG.I-14. Toutefois, l'observation de ces serrations n'est pas systématique bien que d'autres effets liés au DSA soient opérationnels [(Srinivasan et al., 1999), (Hong and Lee, 2004)]. Pour des chargements cycliques effectués à la même vitesse de déformation mais à différentes températures, on constate une augmentation anormale de la valeur maximale de l'amplitude de la contrainte ainsi qu'une chute de l'amplitude de la déformation plastique avec l'augmentation de la température [(Gentet, 2009), (Srinivasan et al., 1999), (Srinivasan et al., 1991), (Mannan, 1993)]. Une sensibilité négative de la valeur maximale de l'amplitude de contrainte et de déformation plastique à la vitesse de déformation a également été mise en évidence (Srinivasan et al., 1999).

La figure FIG.I-15 montre l'effet de la température et de la vitesse de déformation sur les courbes d'écrouissage cyclique d'un acier 316L(N) (Srinivasan et al., 1999). La comparaison entre ces différentes courbes révèle un sur-écrouissage du matériau qui augmente avec la diminution de la vitesse de déformation ou l'augmentation de la température. L'écart entre les courbes correspondant aux différentes vitesses décroît lorsque la température augmente, et un effet positif de la vitesse de déformation réapparaît à 600°C entre 3.10^{-5} s^{-1} et 3.10^{-3} s^{-1} . On note également un

effet néfaste du DSA sur la durée de vie du matériau avec une réduction importante du nombre de cycle à la rupture.

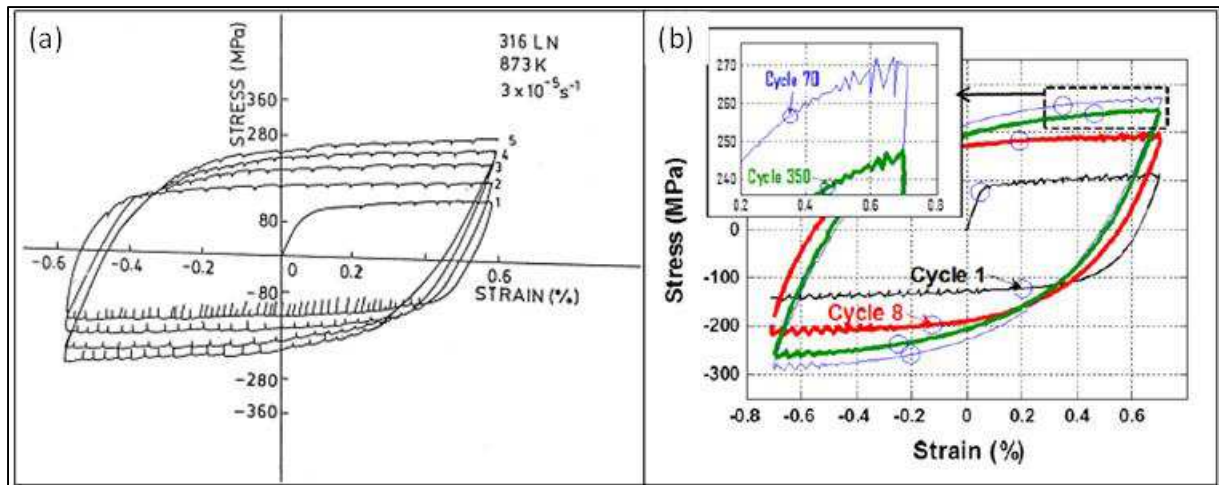


FIG. I-14: mise en évidence des serrations lors de sollicitations cycliques (a) acier 316LN, $\frac{\Delta \epsilon_{tot}}{2} = 0.6\%$, $\dot{\epsilon}_{tot} = 3 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, à 600°C (Srinivasan et al., 1999) (b) acier 316L, $\frac{\Delta \epsilon_{tot}}{2} = 0.7\%$, $\dot{\epsilon}_{tot} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, à 300°C (Pham and Holdsworth, 2012). Pilotage en déformation.

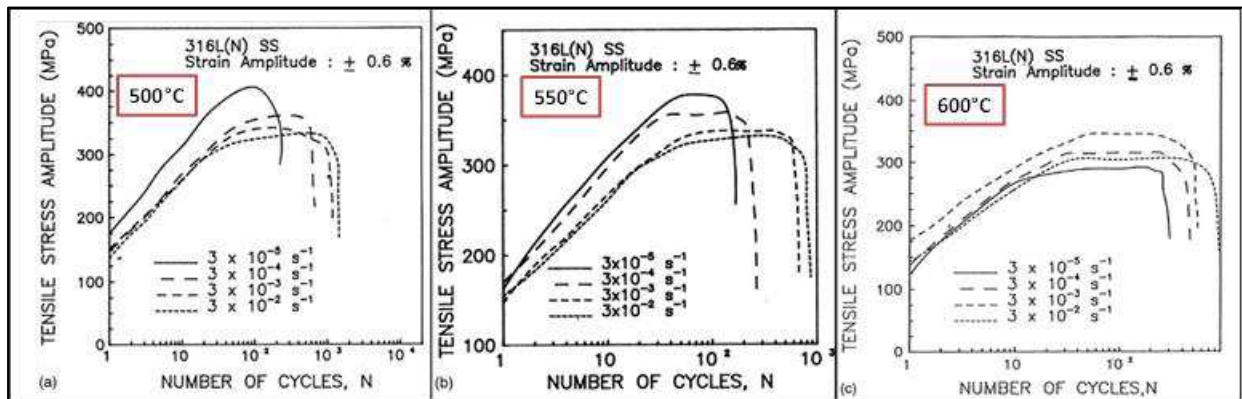


FIG. I-15: Courbes d'érouissage cyclique obtenues sur un acier 316LN pour une amplitude de déformation totale de 0.6%, à différentes températures et vitesses de déformation

Pour les aciers austénitiques et dans le domaine des vitesses de déformation typiques des chargements de fatigue, le phénomène du DSA opère dans un domaine de températures variant entre 573 et 873K. Dans ce domaine, le ratio entre la contrainte maximale et la contrainte au premier cycle augmente au lieu de décroître avec la température, avec la présence d'un pic de ce ratio (de contrainte) entre 773K et 873K [(Srinivasan et al., 1999), (Gentet, 2009)]. Pour l'acier 316L(N), Srinivasan et al. (1999) ont identifié un pic de « haute température » à 823K tandis que Gentet (2009)

a observé, pour le même acier, deux pics, un premier de « basse température » à 675K et un deuxième de « haute température » à 850K.

Afin de comprendre les mécanismes liés au DSA sous chargements cycliques, Gentet (2009) a étudié l'évolution de la contrainte à saturation en fonction de la température pour une vitesse de déformation de $4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ pour un acier 316L(N) (FIG.I-16). Le domaine du sur-écrouissage est observé dans un domaine de température entre 550 et 950K avec l'apparition de deux pics dans le domaine de DSA : un premier à basse température (675K) et un deuxième à haute température (850K). L'évolution des composantes effective athermique Σ_μ et thermiquement activée Σ^* de la contrainte de saturation (FIG.I-16b) permet d'attribuer le premier pic à une augmentation de la force de friction lors du mouvement de la dislocation. Cette augmentation est due à la diffusion des éléments interstitiels, notamment du carbone et de l'azote, à l'intérieur du ruban de faute de la dislocation. Par conséquent, l'énergie de défaut d'empilement diminue défavorisant ainsi le glissement dévié. Quant au deuxième pic, il correspond au pic observé sur la contrainte effective. Il est dû à une ségrégation des atomes de chrome au niveau des jonctions attractives induisant une augmentation de la contrainte nécessaire pour libérer la dislocation. Cette correspondance entre le pic « haute température » et un maximum de la contrainte de friction a été également rapportée par Srinivasan et al. (1999) pour un acier 316L(N).

Dans le domaine des hautes températures, les études se concordent pour attribuer l'effet du DSA à une interaction entre les dislocations mobiles et des éléments substitutionnels, notamment le Chrome [(Srinivasan et al., 1999), (Gerland et al., 1997), (Gentet, 2009), (Blanc, 1986)].

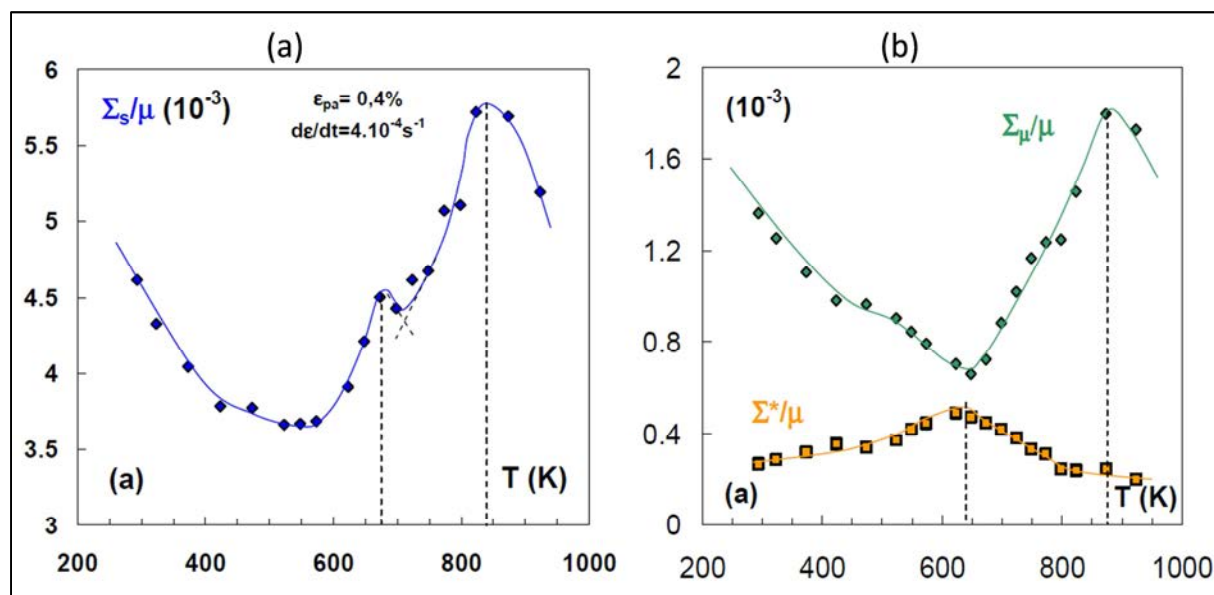


FIG. I-16: Evolution en fonction de la température de (a) la contrainte à saturation normalisée par le module de cisaillement μ (b) des contraintes effective athermique Σ_μ et thermiquement activée Σ^* normalisées ; pour un acier 316LN (Gentet, 2009).

Enfin, on observe un effet important du DSA sur l'évolution des structures de dislocations lors des sollicitations cycliques. L'apparition du DSA semble favoriser le glissement planaire. L'ancrage des dislocations par interaction avec les atomes en solution solide a pour conséquence d'inhiber les mécanismes du glissement dévié et de la montée, retardant ainsi la formation des cellules ([Mannan, 1993], [Gerland et al., 1997], [Srinivasan et al., 1991]). Ainsi, pour le 316L(N), les observations montrent que dans le domaine du DSA, les structures caractéristiques de la fatigue (murs dipolaires, canaux, cellules, ...) disparaissent et des bandes de glissement planaires ainsi que des empilements de dislocations (pile-ups) se forment. Des structures de type « Corduroy » ont également été observés (Pham and Holdsworth, 2012).

3.4. Effet du temps de maintien

De nombreux travaux se sont penchés sur l'étude de l'influence du temps de maintien sur le comportement en fatigue des aciers austénitiques inoxydables à haute température, et notamment des aciers 316L et 316L(N) [(Mottot et al., 1982), (Sauzay et al., 2004), (Ermi and Moteff, 1982), (Srinivasan et al., 1999), (Tavassoli, 1986)]. Au cours des essais voués à étudier l'interaction fatigue-relaxation et/ou fatigue-fluage, une phase de maintien en déformation ou en contrainte est introduite dans chaque cycle, en traction ou en compression, comme le montre la figure FIG.I-17.

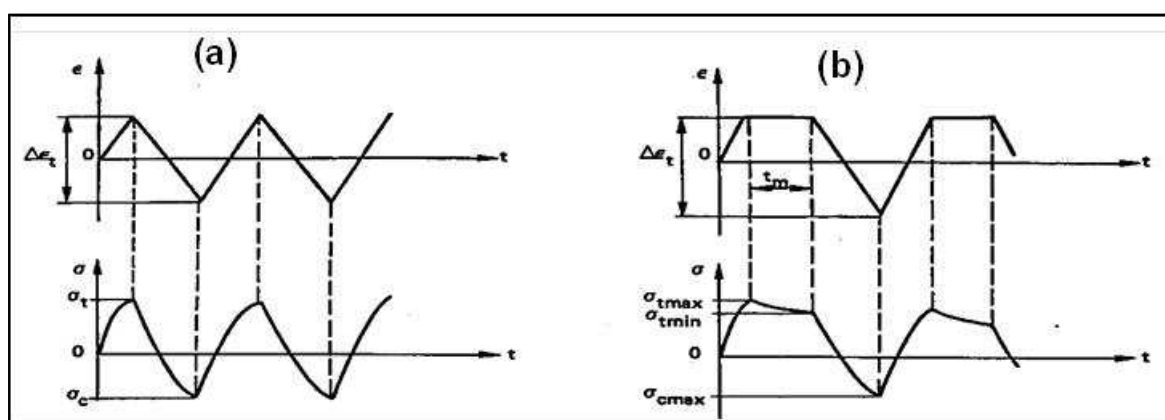


FIG. I-17: Définition du chargement (a) en fatigue pure (b) en fatigue incluant un temps de maintien en relaxation. Les réponses typiques sont également représentées

3.4.1. Effet du temps de maintien sur la réponse mécanique

L'expérience montre un fort effet du temps de maintien sur le comportement du matériau. Toutefois, l'ampleur de cet effet dépend aussi bien de la température que des niveaux des déformations imposées. Les figures FIG.I-18 et FIG.I-19 comparent l'évolution de l'amplitude de la contrainte au cours du cyclage pour différents temps de maintien en traction, à deux températures 600°C et 550°C. On constate une consolidation cyclique plus rapide en fatigue-relaxation qu'en

fatigue pure. Une centaine de cycles est suffisante pour atteindre le niveau de contrainte de 200MPa en fatigue avec maintien tandis qu'il en faut 10 000 pour atteindre le même niveau en fatigue continue.

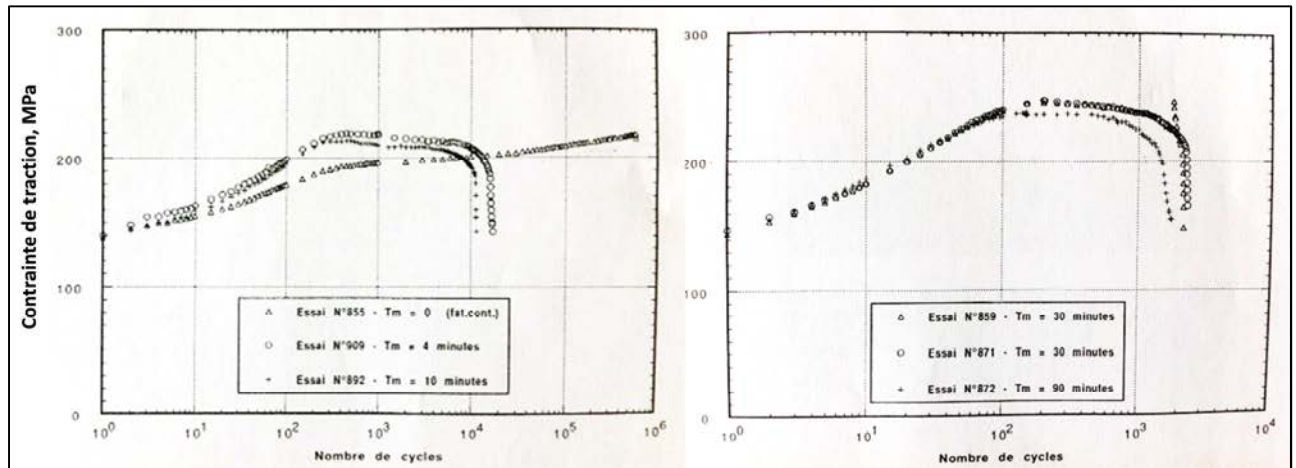


FIG. I-18: Evolution de l'amplitude de contrainte au cours du cyclage pour différents temps de maintien en relaxation (traction). 316LN, $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = 0,2\%$, 600°C (Mottot and Noblecourt, 1996)

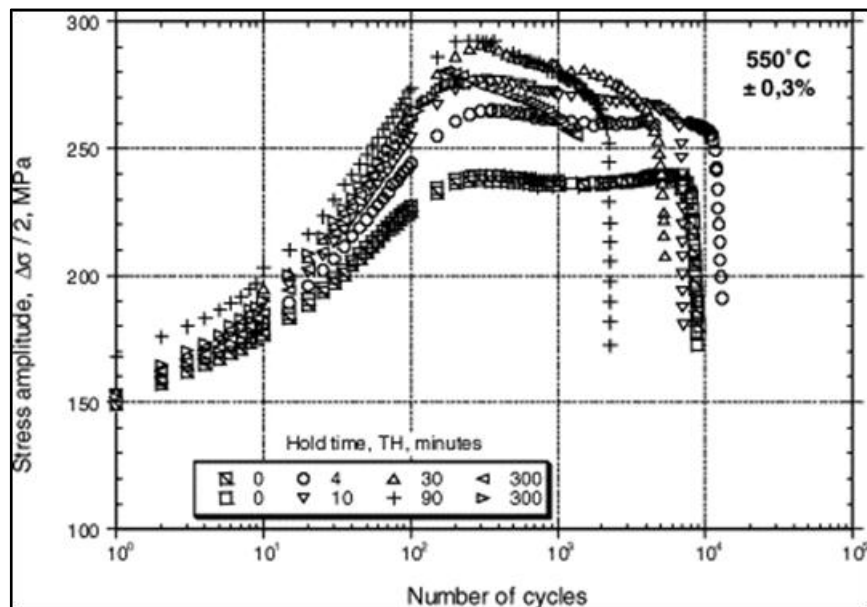


FIG. I-19: évolution de l'amplitude de contrainte au cours du cyclage pour différents temps de maintien de relaxation (traction). Acier 316LN, $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = 0,3\%$, 550°C (Sauzay et al., 2004)

L'effet de la durée du maintien sur l'amplitude de la contrainte à saturation est décrit sur la figure FIG.I-20 pour un acier 316L(N). A 600°C, pour des temps de maintien très courts (inférieurs à 30min), on constate un léger durcissement en fatigue avec maintien par rapport à la fatigue continue, le rapport entre amplitudes de la contrainte en fatigue-relaxation et en fatigue pure est légèrement

supérieur à 1. Pour des temps de maintien plus longs, on constate au contraire un adoucissement du matériau. Plus la durée du maintien augmente plus le matériau adoucit. Cet effet est observé quel que soit le niveau de la déformation imposée et la diminution de l'écrouissage cyclique induite par de longs temps de maintien est plus marquée dans le cas de fortes amplitudes de déformation.

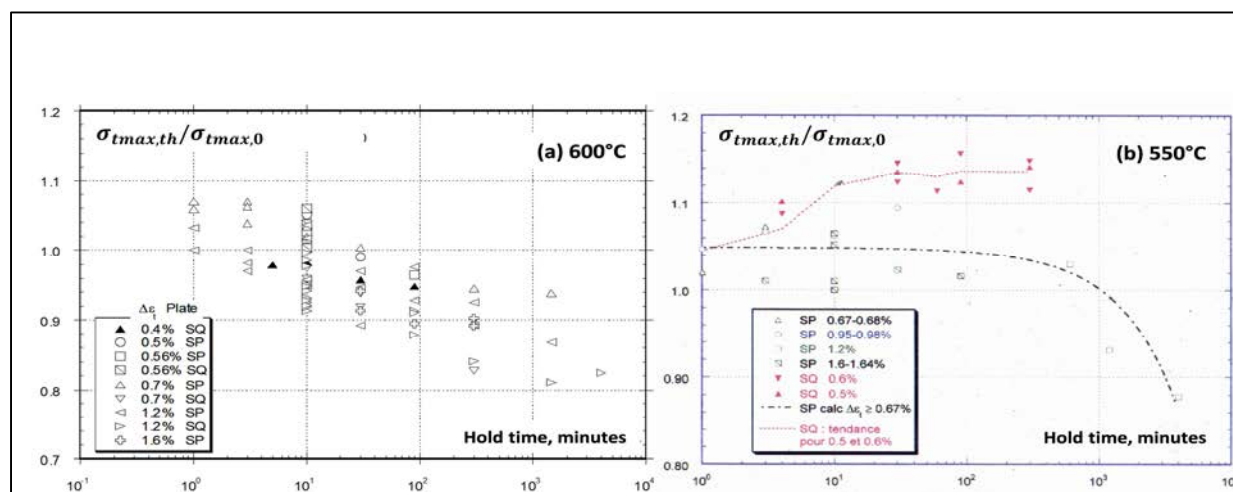


FIG. I-20: Evolution du rapport entre amplitudes de la contrainte en fatigue avec temps de maintien de relaxation en traction ($\sigma_{tmax,th}$) et en fatigue continue ($\sigma_{tmax,0}$) en fonction de la durée du maintien pour un acier 316LN (a) à 600°C (b) à 550°C (Sauzay et al., 2004).

Les résultats sont quelque peu différents à 550°C (FIG.I-20b). En effet, l'influence de la durée du maintien dépend du niveau de l'amplitude de déformation imposée. Pour de fortes déformations, l'effet du temps de maintien est similaire à celui discuté à 600°C. Un maintien de courte durée induit un écrouissage plus important qu'en fatigue continue, tandis qu'une diminution de l'écrouissage cyclique apparaît pour des temps de maintien très longs. La transition entre les deux régimes est décalée à 1000 min (au lieu de 30 min à 600°C). Ce décalage s'explique par le fait que l'activation thermique des mécanismes de viscoplasticité et de restauration est moins importante à 550°C qu'à 600°C. Pour de faibles amplitudes de déformation, seul un sur-durcissement est observé sur tout le domaine du temps de maintien exploré (300min).

Dans le cas d'un maintien en déformation (relaxation), la contrainte relaxe par viscoplasticité et passe d'une valeur σ_{tmax} au début du maintien, à une valeur σ_{tmin} à la fin du maintien (FIG.I-17b). La contrainte relaxée dépend de la durée du maintien (FIG.I-21). A 600°C, la contrainte relaxée augmente avec le temps de maintien. Plus la durée du maintien est longue plus la contrainte en fin de maintien est faible. La relaxation de la contrainte est plus importante pour les fortes déformations.

A 550°C, de même que pour l'amplitude de contrainte à saturation, la relaxation de la contrainte dépend du niveau de la déformation imposée. Ainsi, pour de faibles niveaux de déformation, la relaxation est très limitée et demeure indépendante du temps de maintien, du moins sur le domaine exploré (jusqu'à 300min). Au contraire, le régime des fortes déformations se distingue par une relaxation plus importante et qui augmente considérablement avec le temps de maintien.

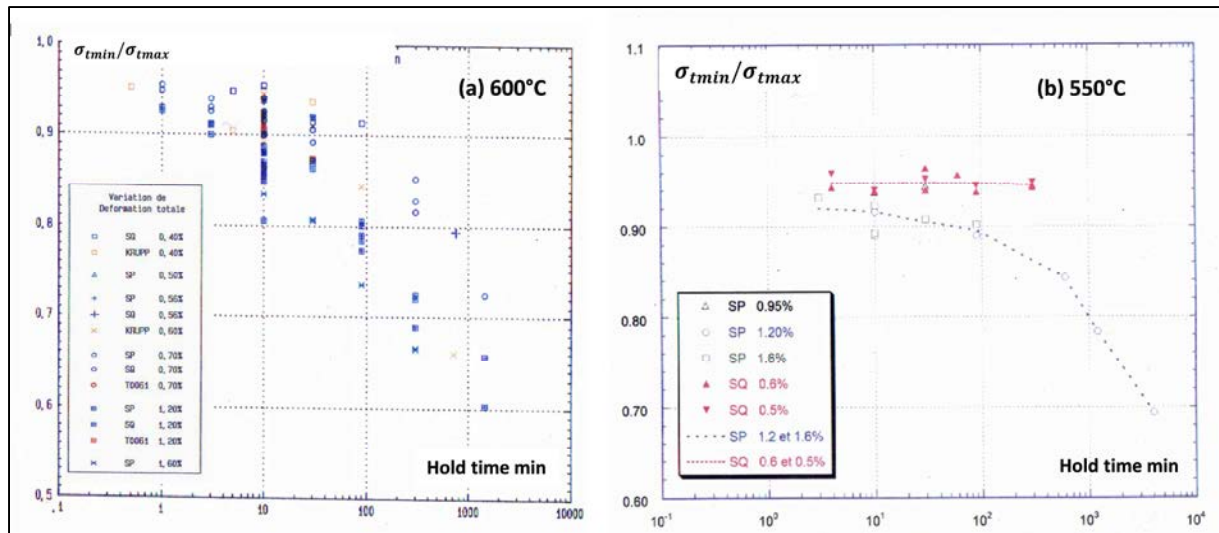


FIG. I-21: Evolution du rapport entre contrainte après et avant relaxation en fonction du temps de maintien pour un acier 316LN (a) à 600°C (b) à 550°C

Enfin, l'expérience montre un effet important de la durée du maintien sur l'endurance ou la durée de vie du matériau. Le nombre de cycles à rupture diminue avec l'allongement de la durée du maintien. La diminution semble plus drastique pour de faibles déformations notamment à 550°C (Sauzay et al., 2004). Aux fortes déformations, la réduction de la durée de vie avec le temps de maintien est limitée et une saturation peut apparaître dans certaines conditions (Sauzay et al., 2004).

3.4.2. Effet du temps de maintien sur les structures de dislocations

L'observation des structures de dislocations développées en fatigue continue et en fatigue-relaxation révèle un effet du temps de maintien sur les mécanismes activés au cours de ces chargements. Les observations de Tavassoli (1986) sur un acier 316L(N) à 600°C (FIG.I-22) montrent qu'en augmentant la durée du maintien, la densité des dislocations diminue et la microstructure traditionnellement observée en fatigue pure est de moins en moins marquée. Les arrangements périodiques caractéristiques de la déformation cyclique se désorganisent lorsque le temps de maintien augmente et disparaissent pour des temps de maintien suffisamment longs. Les murs de dislocation sont de moins en moins denses et disparaissent complètement au profit d'une structure plus homogène pour des temps de maintien suffisamment élevés. Sauzay et al. (2004) ont observé un effet similaire du temps de maintien sur les microstructures formées en fatigue-relaxation dans un acier 316L(N) à 550°C (FIG.I-23). Bougault et al. (1984) ont aussi montré que lors d'essais séquentiels (fatigue puis fluage ou l'inverse) la microstructure du second chargement avait tendance à effacer celle apparue lors du premier chargement.

Le temps de maintien critique pour éviter l'apparition des murs dépend aussi bien de la température que de la déformation imposée. Plus la déformation est forte plus le temps critique est long. Ainsi à 600°C, la durée de maintien nécessaire pour éviter l'apparition des structures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure est de 90 min pour une amplitude de déformation de 0.6% et de

30 min pour une déformation de 0.35% (Tavassoli, 1986). Inversement, le temps critique diminue en augmentant la température. Pour des niveaux d'amplitude de déformation comparables (0.3% à 550°C et 0.35% à 600°C) le temps de maintien critique est de l'ordre de 30 min à 600°C et de 300 min à 550°C [(Tavassoli, 1986), (Sauzay et al., 2004)]. On peut noter que ces temps critiques correspondent aux temps de transition durcissement-adoucissement observés sur les courbes des amplitudes de contrainte – temps de maintien. Ceci laisse penser que la diminution de l'écrouissage cyclique serait le résultat de l'activation thermique des mécanismes de restauration rendant difficile la formation des structures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure.

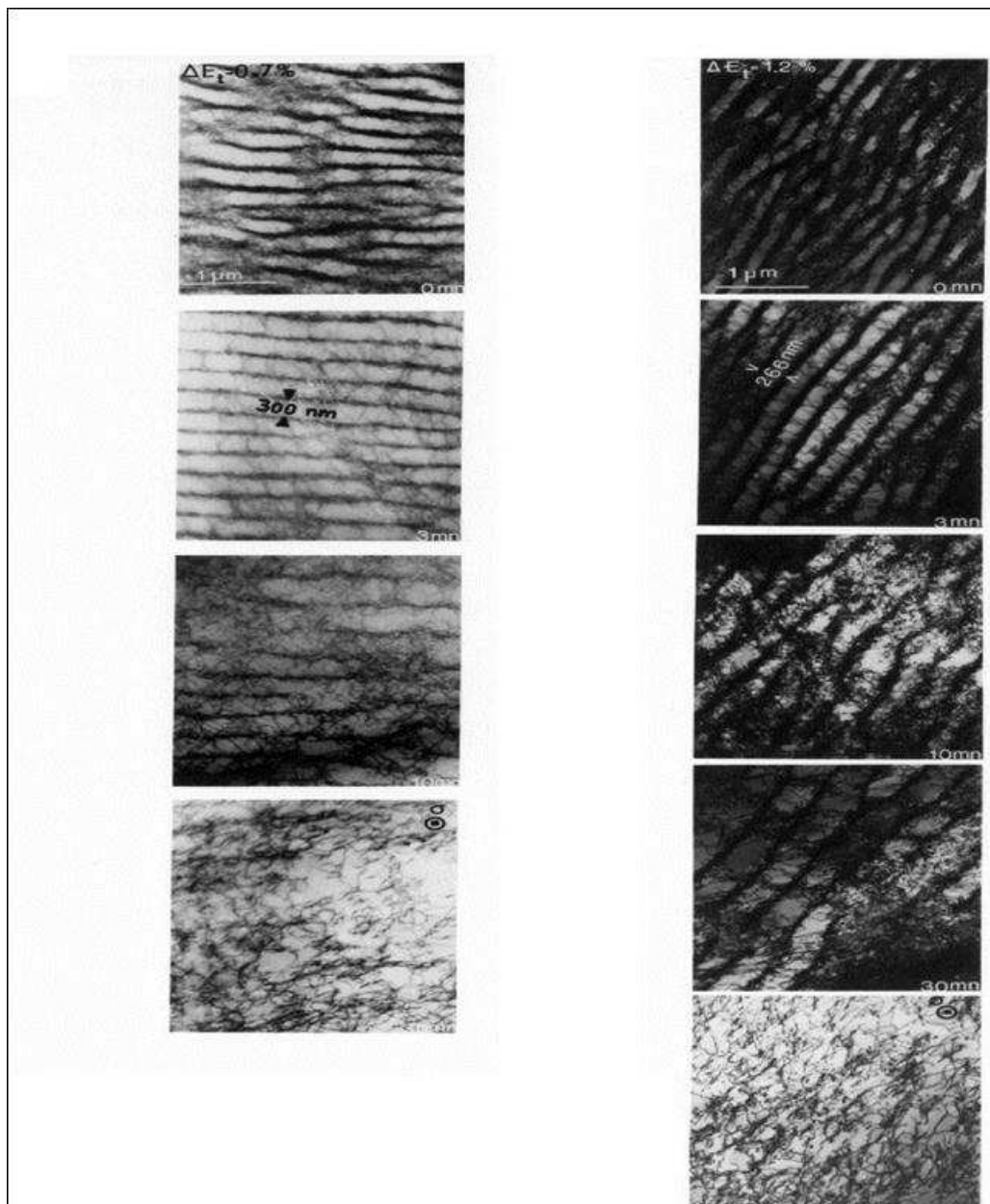


FIG. I-22: Effet du temps de maintien sur les structures de dislocations développées dans un acier 316L à deux amplitudes de déformation à 600°C (Tavassoli, 1986)

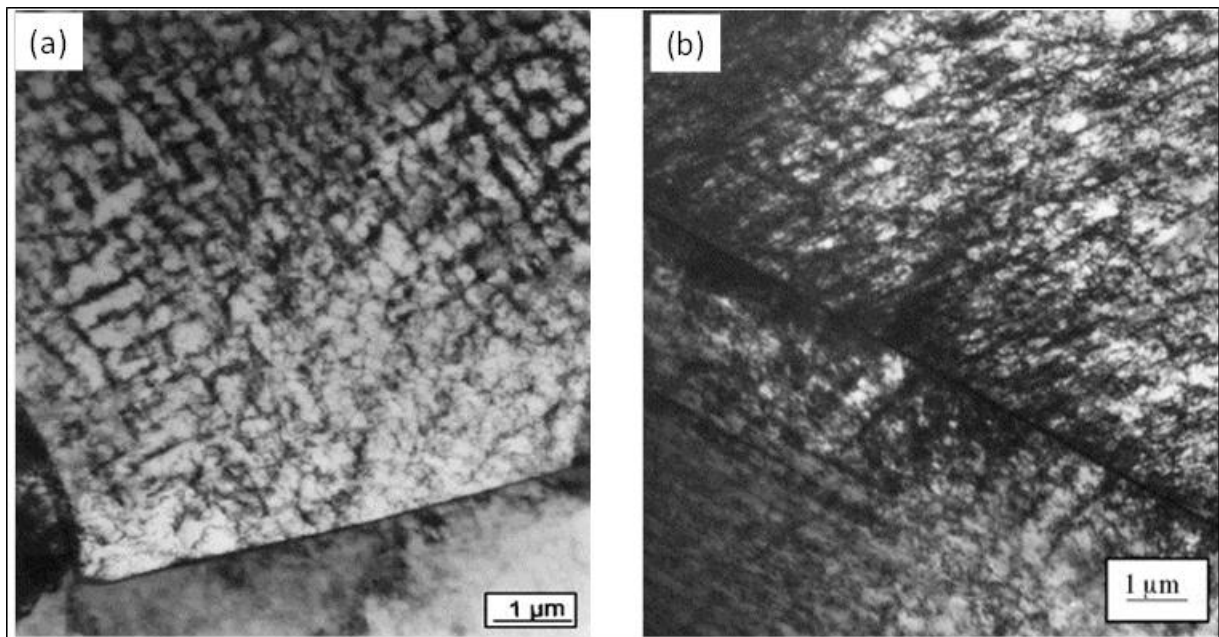


FIG. I-23: structures de dislocations observées dans un acier 316LN à 550°C, $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = 0.3\%$ (a) en fatigue pure (b) en fatigue-relaxation $t_h = 300 \text{ min}$ (Sauzay et al., 2004)

L'effet du temps de maintien sur le comportement cyclique ainsi que sur l'évolution des structures de dislocations se traduit également par un fort impact sur les mécanismes d'endommagement. Les observations effectuées en Microscopie Electronique à Balayage (MEB) sur des faciès de rupture obtenus en fatigue avec maintien montrent l'apparition d'une répartition entre stries et décohésion intergranulaire [(Rezgui, 1982), (Hales, 1980), (Levaillant, 1984)]. Les stries correspondent à une rupture transgranulaire caractéristique de la fatigue pure tandis que la rupture intergranulaire est caractéristique du fluage. Cette répartition évolue avec le temps de maintien, plus le maintien est long moins on observe de stries. Pour des temps de maintien suffisamment longs, les faciès de rupture sont entièrement intergranulaires et ce quels que soient le niveau de déformation et la température.

4. Caractérisation du comportement en fatigue-relaxation du 316L à 500°C

Dans le cadre de ce travail, de nouveaux essais de fatigue pure et de fatigue avec temps de maintien en déformation ont été réalisés à 500°C sur l'acier 316L(N). L'objectif de ces essais a été de caractériser l'impact du temps de maintien sur le comportement cyclique à plus basse température et d'identifier les similarités et/ou différences avec les résultats des essais à 600°C et 550°C conduits auparavant. Ainsi, une vision globale des mécanismes sur une large gamme de température pourra être obtenue et une modélisation de ces mécanismes pourra être validée à partir de nombreux essais.

Trois essais ont été entrepris à amplitude de déformation totale imposée (+/-0.3%) :

- fatigue continue (sans maintien)
- fatigue-relaxation avec 10h de maintien
- fatigue-relaxation avec 50h de maintien

Les temps de maintien choisis sont relativement longs et pour des raisons liées à la disponibilité des machines, les essais de fatigue-relaxation ont été interrompus après stabilisation du niveau de la contrainte (stade de saturation).

4.1. Effet du temps de maintien sur la réponse mécanique

La figure FIG.I-24 présente la réponse cyclique en fatigue pure de l'acier 316L(N) à 500°C pour une amplitude de déformation totale imposée de 0.3%. La courbe d'écrouissage cyclique est en accord avec celles obtenues à 550°C et 600°C (Sauzay et al., 2004). Le début du cyclage se caractérise par un écrouissage qui se traduit par une augmentation progressive de l'amplitude de la contrainte cycle après cycle. Ensuite un stade de saturation s'établit. L'amplitude de la contrainte évolue très peu avec le nombre de cycles. Ce stade de stabilisation est relativement long et représente la majeure partie de la durée de vie du matériau. A la fin de la saturation, l'amplitude de contrainte chute considérablement jusqu'à la rupture du matériau du fait de la présence de fissures.

La figure FIG.I-25 montre les boucles d'hystérésis obtenues pour le même chargement après différents nombres de cycles, jusqu'à stabilisation. L'écrouissage cyclique est là encore mis en évidence avec l'augmentation des niveaux maximal et minimal des contraintes avec le nombre de cycles jusqu'à saturation.

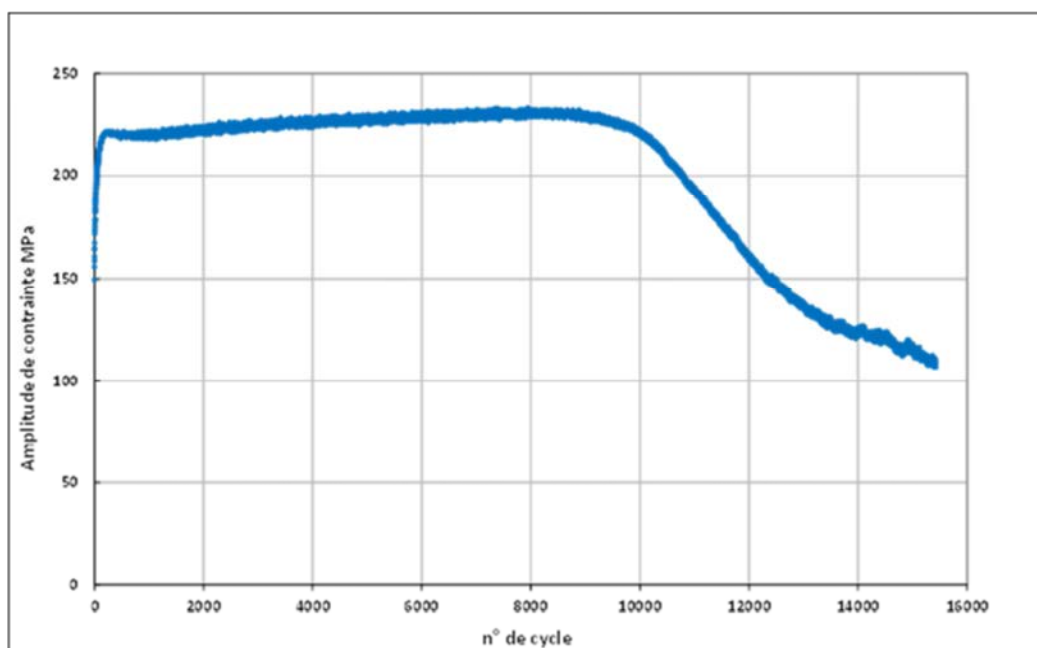


FIG. I-24: Evolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles, en fatigue pure. Acier 316L, 500°C,

$$\frac{\Delta \varepsilon_{tot}}{2} = 0.3\%$$

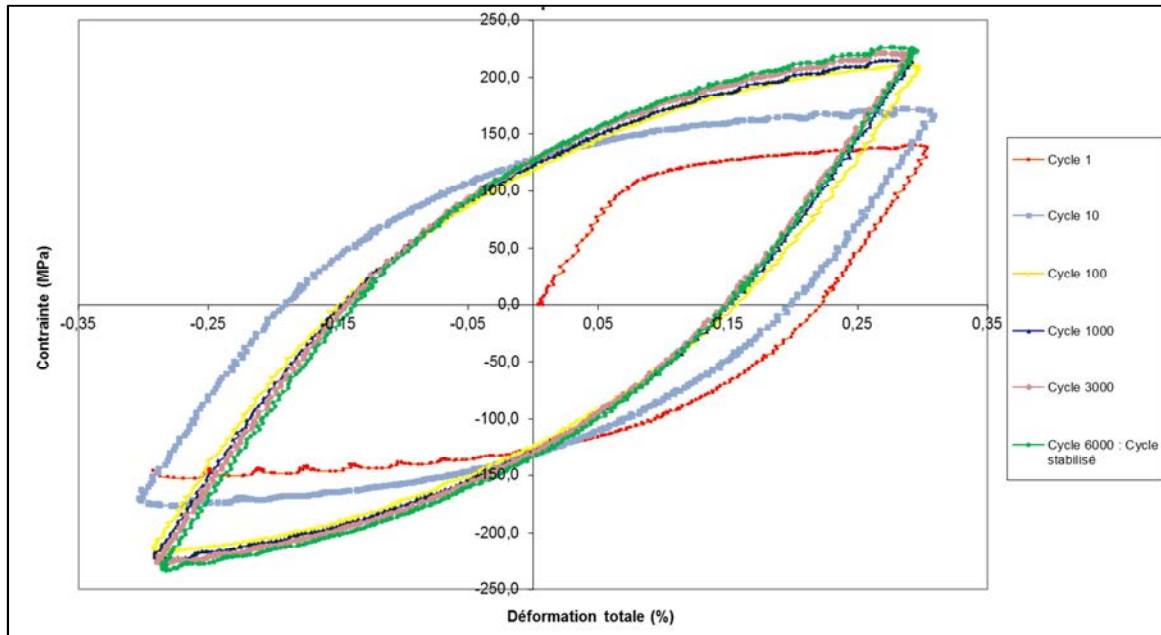


FIG. I-25: Boucles d'hystérésis obtenues à 600°C avec une déformation totale de 0.3% sur un acier 316LN, $t_h=0$.

Les courbes d'évolution de l'amplitude de contrainte au cours du cyclage obtenues en fatigue-relaxation sont présentées sur la figure FIG.I-26. De même qu'en fatigue pure, un durcissement est observé durant les premiers cycles suivi par une stabilisation de l'amplitude de la contrainte, et ce pour les deux temps de maintien étudiés (10h et 50h). Toutefois, le stade d'écroutissage est plus rapide avec temps de maintien qu'en fatigue continue. Plus le temps de maintien est long moins le nombre de cycles nécessaire pour atteindre la saturation est important.

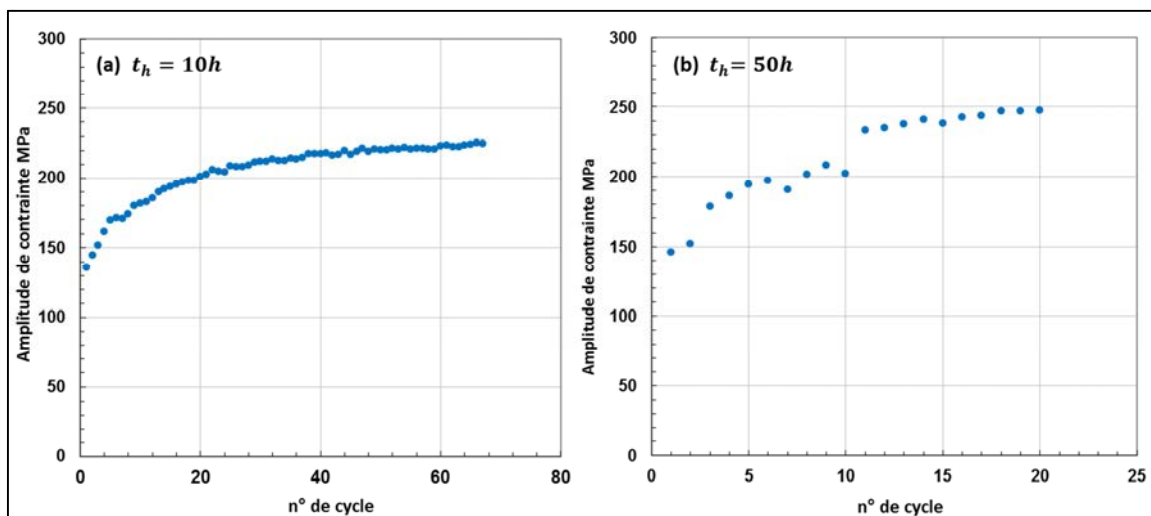


FIG. I-26: Evolution de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles en fatigue-relaxation (a) temps de maintien $t_h=10h$ (b) temps de maintien $t_h=50h$. Acier 316LN, 500°C, $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = 0.3\%$

La figure FIG.I-27 présente l'évolution de la contrainte relaxée $\frac{\sigma}{\sigma_0}$ au cours du maintien (relaxation) à différents nombre de cycles au cours de l'essai de fatigue-relaxation à 50h de temps de maintien. La contrainte σ_0 étant la contrainte maximale atteinte en traction en début du maintien. On note une très faible relaxation des contraintes au cours du maintien et ce même avec des temps de maintien très longs, 50h. Sur la figure FIG.I-27, seuls quelques maintiens, « cohérents », sont représentés, car pour les autres cycles des taux de relaxation de contrainte supérieurs à 1 ont été mesurés. Ceci est fort probablement dû à la très faible relaxation de la contrainte qui serait mal gérée par la machine au cours de l'essai.

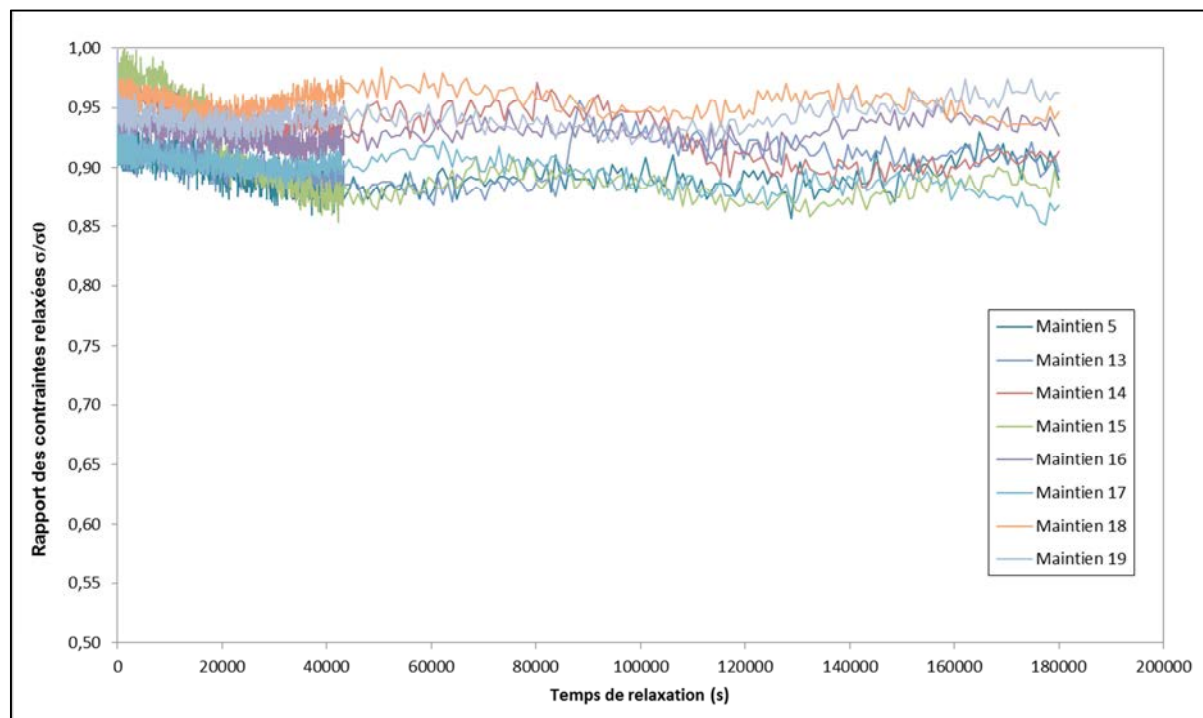


FIG. I-27: Evolution de la contrainte relaxée au court du maintien pour différents nombres de cycles. Acier 316LN à 500°C, 0.3% de déformation et 50h de temps de maintien en traction.

En comparant les amplitudes de contrainte à saturation mesurées pour les trois essais, on observe un effet durcissant du temps de maintien, et ce même pour une durée de maintien très longue (50h) (TAB.I-2). Le durcissement augmente légèrement avec le temps de maintien. Ce constat est en accord avec les résultats des essais à 550°C pour des amplitudes de déformation imposée comparables (0.3%) (Sauzay et al., 2004). Le manque de résultats à 550°C pour de très longs temps de maintien ne permet pas de conclure sur la généralisation d'un effet durcissant du temps de maintien aux faibles déformations ($t_h \leq 5h$ (300min)). Cependant, les essais menés à 500°C semblent aller dans ce sens.

Temps de maintien (h)	Amplitude de contrainte à saturation (MPa)	Rapport $\sigma_{max,th}/\sigma_{max,0}$
$t_h = 0$ (fatigue pure)	220	1
$t_h = 10h$	225	1.022
$t_h = 50h$	247	1.122

TAB.I-2 : Effet du temps de maintien sur l'amplitude de contrainte. Acier 316LN, 500°C, $\frac{\Delta\epsilon_{tot}}{2} = 0.3\%$

En ce qui concerne la relaxation de la contrainte au cours du maintien à déformation constante, elle demeure très limitée. Ceci se traduit par une dispersion assez importante des mesures de la contrainte relaxée à chaque cycle. Cependant, la relaxation des contraintes est légèrement plus importante en fatigue-relaxation avec 50h de maintien qu'avec 10h de maintien. Le rapport entre contraintes après et avant maintien, à saturation, est de l'ordre de 0.87 pour $t_h=10h$ et 0.96 pour $t_h=50h$. Ce résultat confirme ceux obtenus à 550°C aux faibles amplitudes de déformation. La relaxation de la contrainte est également très faible et quasiment indépendante du temps de maintien (jusqu'à 300 min).

Cette faible relaxation peut s'expliquer par une compétition entre différents mécanismes thermiquement activés. Il s'agit d'une part des mécanismes de restauration et de viscoplasticité favorisant la relaxation, et d'autre part des mécanismes liés au vieillissement dynamique et aux interactions entre dislocations et éléments d'alliage, dont l'effet est plutôt durcissant. Ces différents mécanismes seront discutés ultérieurement.

4.2. Effet du temps de maintien sur la microstructure

Des observations par Microscopie Electronique en Transmission (MET) ont été réalisées sur des lamelles prélevées à partir des éprouvettes testées en fatigue pure et en fatigue-relaxation à 500°C et à amplitude de déformation totale de 0.3%. Pour chaque échantillon, une vingtaine de grains ont été observés. Les structures de dislocations dépendent relativement du grain observé. Cependant, des structures similaires ont été observées dans la majorité des grains observés.

En fatigue pure, les microstructures de dislocations sont composées de murs denses séparés par des canaux de faible densité de dislocation (FIG.I-28). Ces structures ressemblent à celles observées à 550°C et 600°C et sont caractéristiques de la fatigue oligocyclique [(sauzay et al., 2004), (Gerland et al., 1997)].

L'introduction d'un temps de maintien impacte les microstructures de dislocations formées. Ainsi, en fatigue-relaxation avec 10h de maintien, la microstructure est beaucoup moins marquée qu'en fatigue pure. On devine des cellules dont les murs sont lâches et à peine visibles. Les dislocations

sont plus allongées, et les murs beaucoup moins denses. Toutefois, les structures de dislocations ne disparaissent pas complètement et des arrangements en zones relativement denses et zones « molles » sont observés (FIG.I-28). On observe également de petits défauts dans les canaux, fort probablement des débris d'une annihilation incomplète des dislocations et/ou des petites boucles de dislocations.

Enfin, en fatigue-relaxation avec 50h de maintien, la microstructure caractéristique de la fatigue continue disparaît complètement. Les mécanismes de restauration induisent une structure de dislocations homogène, avec la formation d'empilements de dislocations. Les défauts sont beaucoup moins nombreux ce qui suggère une absence de phases dures avec 50h de maintien.

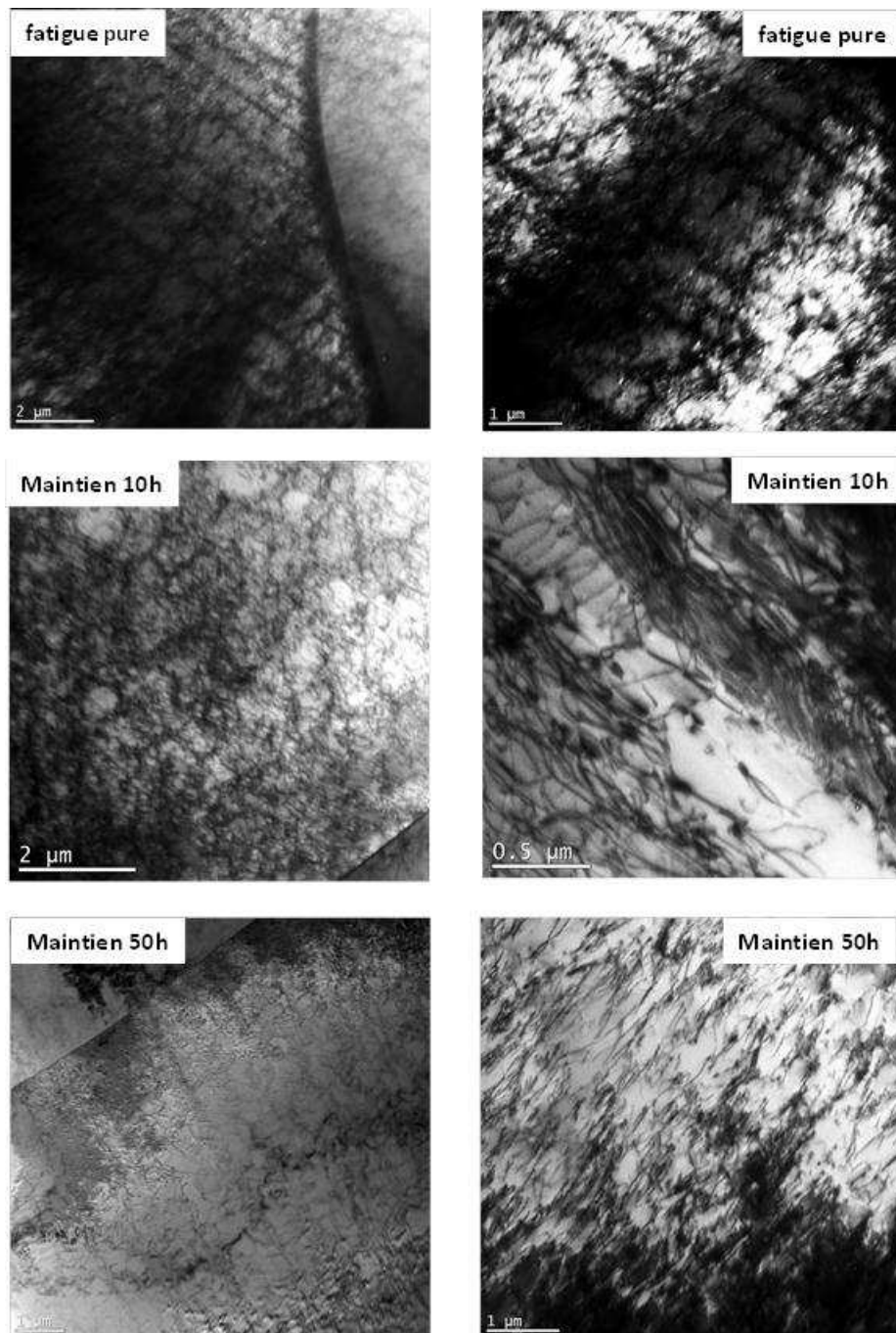


FIG. I-28: Evolution des structures de dislocations formées avec le temps de maintien

4.3. Etude du vieillissement dynamique à 600°C

Dans le cadre de cette étude, des essais de traction monotone ont été menés sur l'acier 316L(N) (tôle SQ) à 600°C à différentes vitesses de déformation imposées ($2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, $2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ et $2 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$). L'objectif de ces essais est d'une part de vérifier la présence ou non du DSA à une température aussi élevée. D'autre part, nous nous sommes particulièrement intéressés au domaine des faibles vitesses, comparables à celles rencontrées dans des chargements de relaxation et de fluage, afin d'identifier les différents domaines caractérisant l'interaction dislocations-atomes de solutés.

La figure FIG.I-29 présente les courbes obtenues pour les deux vitesses $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ et $2 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$. La courbe correspondant à la vitesse la plus élevée ($2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) se caractérise par l'apparition d'importantes serrations et ce dès les premiers stades de la déformation plastique. La chute de la contrainte liée à ces serrations est tout aussi importante. Ce constat est en accord avec la courbe obtenue par Lee et al. (2006) pour un acier 316L à la même température mais à une vitesse de $2 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ (FIG.I-29b). Toutefois, les amplitudes des chutes de contraintes mesurées dans cette étude sont relativement élevées ce qui laisse penser à un effet additionnel liée à l'asservissement de la machine. En diminuant la vitesse de déformation imposée, les serrations deviennent beaucoup moins fréquentes voire inexistantes. Néanmoins, ce constat est à considérer avec prudence car il peut dépendre de la fréquence de l'enregistrement des points expérimentaux ainsi que de leur dispersion.

En regardant de plus près les serrations (FIG.I-29a), nous notons qu'elles correspondent à des montées élastiques et rapides de la contrainte suivies par des chutes plastiques. La partie croissante de chaque serration correspond au blocage des dislocations mobiles par un nuage d'atomes de soluté, d'où la pente élastique suivie jusqu'à déblocage. Une fois la contrainte critique atteinte, les dislocations se libèrent de leur nuage et se mettent en mouvement (glissement plastique) induisant une déformation plastique, jusqu'à ce qu'elles soient bloquées à nouveau par la formation d'un autre nuage car le temps de diffusion a été suffisamment long.

La comparaison des courbes obtenues pour les différentes vitesses a permis d'identifier deux domaines de vitesses de déformation (FIG.I-30 a et b). En raison du nombre important des points de mesure, les courbes de traction expérimentales à 600°C ont été lissées afin de pouvoir les comparer.

Pour les vitesses comprises entre $2 \cdot 10^{-3}$ et $2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$, un effet inverse de la vitesse de déformation est observé (FIG.I-30b) (régime de DSA). La sensibilité à la vitesse devient ensuite positive entre $2 \cdot 10^{-7}$ et $2 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$. Dans ce domaine (faibles vitesses de déformation), le blocage des dislocations par les impuretés n'est plus opérationnel et un régime de « traînage » apparaît. En effet, pour de faibles vitesses de déformation, la mobilité des dislocations étant très lente et comparables à la mobilité des atomes de soluté, il leur est impossible de se libérer des nuages d'impuretés. Par conséquent, les nuages d'atomes de solutés sont « traînés » par les dislocations en mouvement. Les atmosphères de solutés n'étant plus des obstacles au glissement des dislocations dans le domaine du « trainage », on retrouve l'effet positif de la vitesse (Blanc, 1986). Les solutés induisent alors une force visqueuse sur la dislocation.

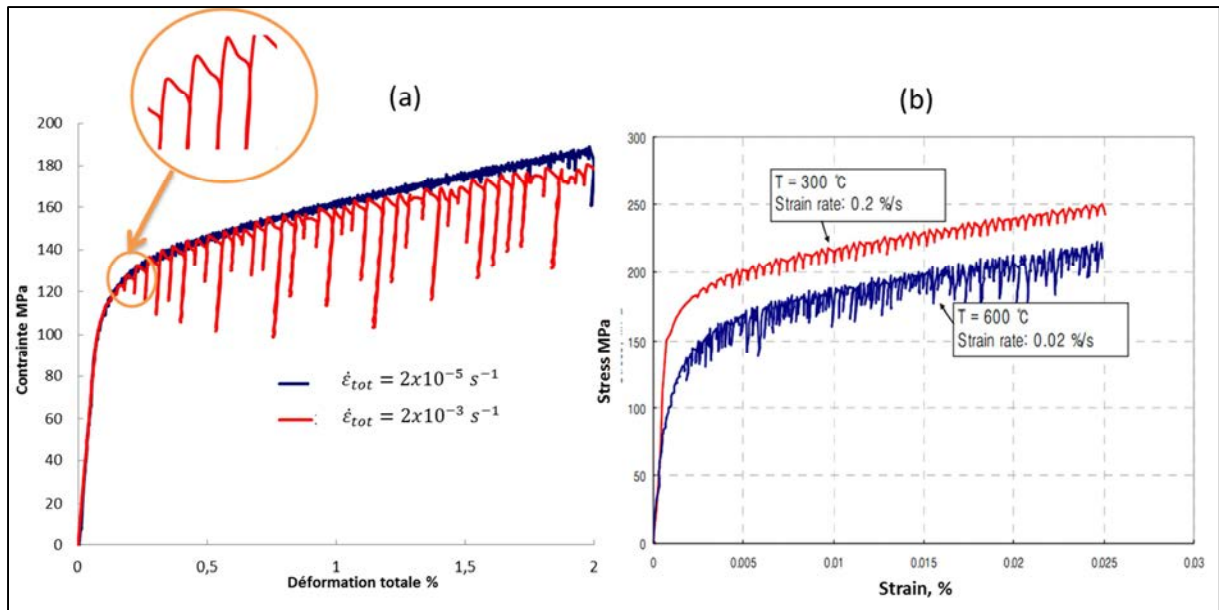


FIG. I-29: (a) courbes de traction à 600°C et à deux vitesses de déformations 2.10^{-3} et 2.10^{-5} s^{-1} pour un acier 316L(N) (b) courbe de traction à 600°C et à une vitesse de 2.10^{-4} s^{-1} pour un acier 316L (Lee et al., 2006)

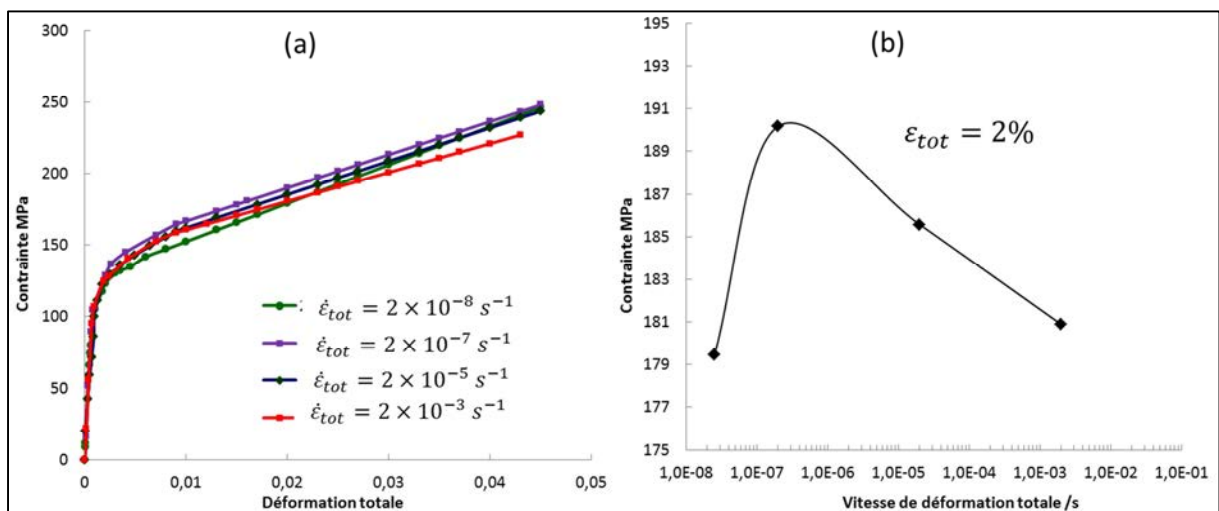


FIG. I-30: Courbes de traction moyennes à 600°C et à différentes vitesses de déformation imposées pour un acier 316L(N) (b) diagramme contrainte – vitesse de déformation imposée à une déformation totale de 0.2% pour un acier 316LN à 600°C.

5. Discussion

L'évolution du comportement mécanique et des arrangements des dislocations en fatigue pure et en fatigue-relaxation est le reflet d'une synergie et/ou d'une concurrence entre différents mécanismes physiques. De manière générale, la contrainte macroscopique se décompose en trois composantes, chacune est reliée à un ou plusieurs mécanismes microscopiques (Lemaitre and Chaboche, 1987), ainsi :

$$\sigma = \Sigma_{\mu} + \Sigma^* + X$$

Σ_{μ} étant la contrainte de friction (isotrope), Σ^* la contrainte thermiquement activée et X la contrainte cinématique à longue portée.

La contrainte isotrope (Σ_{μ}) est athermique et correspond aux interactions à courte distance (short-range stress). Elle peut être liée aux interactions dislocation-dislocation ou dislocation-atomes de soluté (Haasen, 1984). La composante visqueuse (Σ^*) est quant à elle thermique et traduit la viscosité du matériau. Elle dépend de la température et de la vitesse de déformation, les deux paramètres qui gouvernent les mécanismes thermiquement activés (Haasen, 1984). Enfin, la contrainte cinématique est induite par les interactions à longue distance (long-range stress). Athermique, elle est due aux incompatibilités intra- et inter-granulaires. Dans le cas de chargements cycliques, ces incompatibilités de déformation dans les grains se traduisent par le développement de structures de dislocations constituées de phases dures (murs dipolaires) et de phases molles (canaux) ainsi que par des incompatibilités de déformation plastique entre grains (incompatibilités intergranulaires).

En fatigue-relaxation, les essais mécaniques ainsi que les observations microstructurales permettent d'identifier deux grands types de mécanismes physiques liés à l'introduction du maintien. Ces mécanismes sont thermiquement activés et se situent à l'échelle des dislocations dont la mobilité dépend de leurs interactions avec d'autres obstacles (arbres de forêt, éléments d'alliage).

Le premier mécanisme correspond à la restauration par annihilation des dislocations durant le temps de maintien. Durant le cyclage, des dipôles sont formés par rapprochement de dislocations coins parallèles et de signes opposés. Ces dipôles s'organisent sous forme de murs induisant un écrouissage du matériau. Toutefois, lors du maintien, l'activation thermique favorise la diffusion des lacunes entre les deux dislocations d'un dipôle induisant l'annihilation de ces deux dislocations et donc la disparition du dipôle par montée (Prinz et al., 1982). Pour des temps de maintien suffisamment longs, les mécanismes de restauration ne permettent pas l'apparition de la phase dure (murs dipolaire). Pour l'acier 316L(N), La durée critique du maintien pour obtenir une microstructure de dislocations homogène est de l'ordre de 30 min à 600°C, 300 min à 550°C et de 3000 min à 500°C, pour une amplitude de déformation totale de 0.3%. L'absence d'une microstructure bi-phasique (phase molle et phase dure) se traduit par une réduction des incompatibilités intra-granulaires de la déformation plastique induisant donc une baisse de la composante cinématique de la contrainte macroscopique (Sauzay et al., 2004). A partir des observations en MET réalisées par Feaugas et al. (2008) sur un acier 316LN, Gentet (2009) a évalué les valeurs des composantes inter- et intra-granulaires de la contrainte cinématique au cours d'un essai de relaxation à 600°C et pour une déformation plastique de 0.4% (FIG.I-31b). On note effectivement une réduction de la contrainte cinématique intra-granulaire (X_{intra}) au cours de la relaxation. Toutefois, cette réduction reste

largement limitée et n'explique pas à elle seule la réduction de la contrainte cinématique totale X (FIG.I-31b). En effet, comme le montre la figure FIG.I-31a, la diminution de la contrainte X est également associée à la diminution de la composante cinématique inter-granulaire (X_{inter}). Durant le maintien, l'activation de la déformation viscoplastique dans les grains favorise la continuité du glissement viscoplastique d'un grain à un autre réduisant ainsi les incompatibilités inter-granulaires de la déformation plastique. Cette réduction semble affecter beaucoup plus la contrainte cinématique totale que la diminution de la composante intra-granulaire.

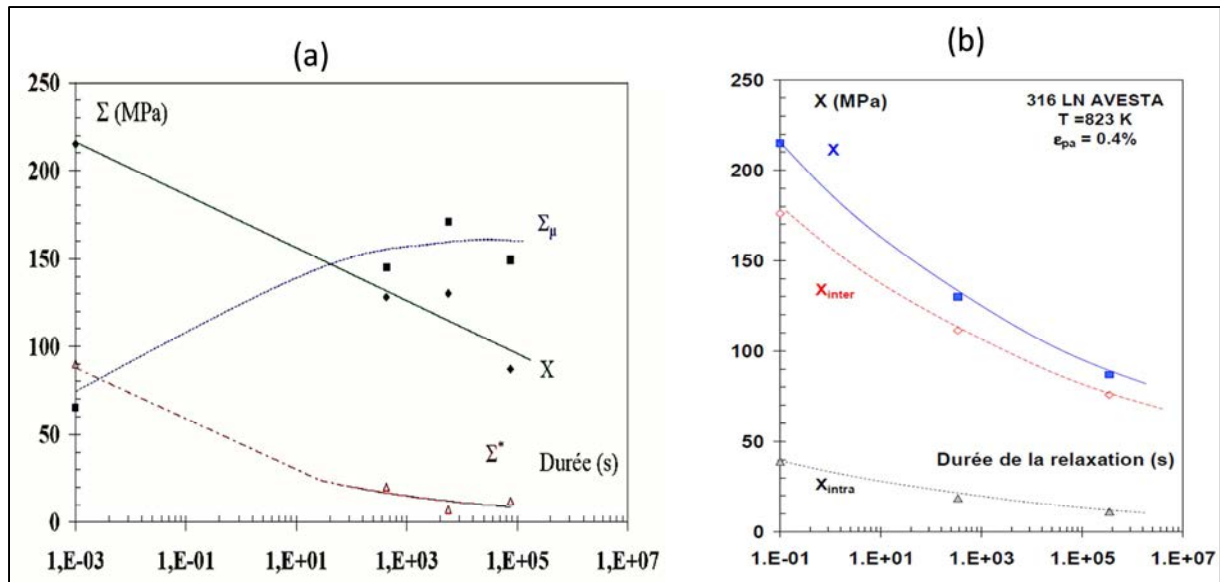


FIG. I-31: l'évolution des composantes de la contrainte durant la relaxation (Gentet, 2009)

Le deuxième mécanisme est lié aux interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de soluté (vieillissement dynamique). Ce mécanisme affecte principalement la contrainte de friction (isotrope). Durant le temps de maintien en déformation (relaxation), l'activation thermique de la diffusion des atomes en solution solide favorise le blocage des dislocations par formation d'atmosphères d'impuretés. La vitesse des dislocations mobiles est de plus en plus lente au cours de longs temps de maintien ce qui facilite encore plus le blocage de ces dislocations. Ce mécanisme de vieillissement dynamique entraîne une augmentation de la contrainte isotrope (Σ_{μ}) nécessaire pour libérer les dislocations de leurs nuages d'impuretés. La figure FIG.I-31a met en évidence l'augmentation de la contrainte isotrope au cours de la relaxation (Gentet, 2009). En fatigue avec un temps de maintien court, Sauzay et al. (2004) montrent que la contrainte isotrope mesurée juste après la relaxation est plus importante que celle mesurée en fatigue pure. De la même manière, des mesures effectuées à partir d'essais séquentiels (fatigue pure -relaxation de 15 jours – fatigue pure) réalisés sur un acier 31LN à 600°C et 550°C (Sauzay et al., 2004) montrent une augmentation de la composante isotrope après la relaxation de l'ordre de 90MPa et ce pour les deux températures. Par conséquent, le durcissement observé en fatigue-relaxation avec des temps de maintien courts par rapport à la fatigue pure ainsi que la faible relaxation de la contrainte en fatigue avec temps de maintien observés à 600°C, 550°C et 500°C s'expliqueraient par une augmentation de la contrainte de friction due au vieillissement dynamique.

6. Conclusions

La synthèse des différentes études disponibles dans la littérature a permis de caractériser le comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables 316L et 316LN en fatigue à température ambiante et à haute température ainsi qu'en fatigue-relaxation. Les essais de fatigue-relaxation montrent que le temps de maintien affecte le comportement cyclique du matériau. Cet effet peut se traduire par un écrouissage cyclique plus fort ou plus faible par rapport au comportement en fatigue pure, selon la température et/ou le niveau de l'amplitude de déformation.

Les résultats des essais de fatigue pure et de fatigue-relaxation menés à 500°C vont dans le même sens que ceux obtenus à 600°C et à 550°C pour de faibles amplitudes de déformation imposée. Le temps de maintien induit un léger sur-écrouissage même pour une durée de maintien très longue (50h). La relaxation de la contrainte durant le maintien demeure très limitée. Les observations MET de l'évolution des structures de dislocations avec le temps de maintien montrent l'existence d'un temps de maintien critique nécessaire pour éviter l'apparition des structures de dislocations caractéristiques de la fatigue oligocyclique et l'homogénéisation de la microstructure. Ce temps critique diminue avec l'augmentation de la température (30 min à 600°C, 300 min à 550°C et 50h à 500°C).

Les essais de traction monotone conduits à 600°C et à différentes vitesses de déformation totale imposée (de 2.10^{-8} s^{-1} à 2.10^{-3} s^{-1}) ont permis de mettre en évidence le phénomène du vieillissement dynamique dans le 316LN à cette température.

Ces différents résultats ont été ensuite discutés en lien avec les différents mécanismes régissant des chargements aussi complexes que la fatigue-relaxation (ou fatigue-fluage), à savoir la plasticité cyclique, la restauration par la montée, la viscoplasticité, les interactions dislocations-atomes de soluté... etc. L'identification et la compréhension de ces mécanismes représentent une phase importante dans l'élaboration d'un modèle de comportement permettant des prédictions dans les conditions de service.

7. Références

- AFCEN. 2002. RCC-MR-2002 Tome 1.
- Alain, R., Violan, P., Mendez, J., 1997. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 229, p. 87.
- Blanc, D., 1986. Thèse de Doctorat en Sciences et génie des matériaux, ENSMP.
- Bougault, A., Bisson, A., Tavassoli, A. A., 1984. note technique SRMA 84-1294.
- Cailletaud, G., Nouailhas, D., Grattier, J., Levillant, C., Mottot, M., Tortel, J., Escaravage, C., Hélot, J., Kang, S., 1984. *Nucl. Eng. and Design*, vol. 83, p. 267.
- Catalao, S., X. Feaugas, Ph Pilvin et M. Th Cabrillat. 2005. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 400, p. 349.
- Chevenard, P., 1929. *C. R. Acad. Sci.*, vol. 189, p. 576 et p. 846.
- Choudhary, B. K., 2014. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 603, p. 160.
- Cottrell, A.H., 1953. In: *Dislocations and Plastic Flow in Crystals*, Oxford University, London.
- Ermi, A.M., Moteff, J., 1982. *Metall. Trans. A*, vol. 13A, p. 1577.
- Feaugas, X. 1999. «Contribution à la compréhension des mécanismes de déformation plastique et d'endommagement des matériaux». Mémoire d'habilitation à diriger les recherches.
- Gaudin, C., 2002. Thèse de Doctorat, Université de Technologie de Compiègne.
- Gentet, D., 2009. Thèse de Doctorat, Université de La Rochelle.
- Gerland, M., Alain, R., Ait Saadi, B., and Mendez, J., 1997. *Mat. Sci. and Eng.* vol. 229, p. 68.
- Gerland, M., Mendez, J., Violan, P., Ait Saadi, B., 1989. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 118, p. 83.
- Guillet, L., 1904. *Rev. Metal.*, vol. 2, p. 155.
- Haasen, P., 1984. *Mechanical properties of solid solutions and intermetallic compounds*, third ed. In: Cahn, R. W., Haasen, P. (Eds.), *Physical Metallurgy*, vol. II. North-Holland, Amsterdam, p. 1341.
- Haddou, H., 2003. Thèse de doctorat, Université de Technologie de Compiègne.
- Hales, R., 1980. *Fat. Frac. of Eng. Mat. And Struct.*, vol. 3, p. 339.
- Hong, S.-G., Lee, S.-B., 2005. *J. Nucl. Mater.*, vol. 340, p. 307
- Hong, S.G., Lee, S.B., 2004. *J. Nucl. Mater.*, vol. 328, p. 23.
- Kruml, T., Polak, J., Obtrlik, K., Degallaix, S., 1997. *Acta Mater.*, vol. 45, p. 5145.
- Lee, S.-H., Kim, J.-B., Lee, H.-Y., Lee, J.-H., 2006. *Transactions of the Korean Nuclear Society Autumn Meeting*, Gyeongju, Korea, November 2-3, 2006
- Lemaitre, J., Chaboche, J.-L., 1987. *Mech. of Sol. Mat.* Springer-Verlag, Berlin.
- Levillant, C., 1984. Thèse de Doctorat, Université de Technologie de Compiègne.
- Levillant, C., Grattier, J., Mottot, M., Pineau, A., 1988. *Creep and creep-fatigue intragranular damage in austenitic stainless steels : discussion of the creep dominated regime*. In: Solomon, H.D., Halford, G. R., Kaisand, L. R., Leis, B. N. (Eds), *Low Cycle Fatigue*, ASTM STP 942. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, p. 414.
- Li, Y. and Laird, C., 1994. *Mat. Sci. and Eng.*, vol. 186, p. 87.
- Mannan, S. L., 1993. *Bull. Mat. Sci.*, vol. 16, No. 6, p. 561.
- McCormick, P.G., 1972. *Acta Metall.*, vol. 20, p. 351.
- Mottot, M., Pétrequin, P., Amzallag, C., Rabbe, P., Grattier, J., Masson, S., 1982. Amzallag, C. , Leis, B. N., Rabbe, P., (Eds.), *Low-Cycle Fatigue and Life Prediction*, ASTM STP 770, American Society for Testing and Materials, Philadelphia, p. 152.
- Obtrlik, K., Kruml, T., Polák, J., 1994. *Mat. Sci. and Eng.*, vol. 187, p. 1.
- Pham, M. S., Holdsworth, S. R., Janssens, K. G. F., Mazza, E., 2013. *Int. J. of Plast.*, vol. 47, p. 143.

Pham, M. S., Solenthaler, C., Janssens, K. G. F., Holdsworth, S. R., 2011a. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 528, p. 3261.

Pham, M. S., Holdsworth, S. R., 2011b. *Proc. Eng.*, vol. 10, p. 1069.

Pham, M. S., Holdsworth, S. R., 2012. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 556, p. 122.

Polak, J., Obertlik, K., Hajek, M., Vasek, A., 1992. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 151, p. 19.

Polak, J., Obertlik, K., Hajek, M., 1994. *Fat. Frac. Eng. Mater. Struct.*, vol. 17, p. 773.

Portevin, A., 1909. *Iron and Steel Institute, Carnegie Scholarship, Memoirs* 1, p. 230.

Prinz, F., Argon, A. S., Moffat, W. C., 1982. *Acta Metall.*, vol. 30, p. 821.

Rezgui, B., 1982. *Thèse de Doctorat*, Paris XI, Orsay.

Samuel, K. G., Mannan, S. L., Rodriguez, P., 1988. *Acta Metall.*, vol. 36, p. 2323.

Sauzay, M., Mottot, M., Allais, L., Noblecourt, M., Monnet, I., Périnet, J., 2004. *Nucl. Eng. and Design*, vol. 232, p. 219.

Sauzay, M., Kubin, L.P., 2011. *Prog. in Mat. Sc.*, vol. 56, p. 725.

Sleeswyk, A.W., 1985. *Acta Metall.*, vol. 6, p. 598.

Srinivasan, V.S., Sandhya, R., Bhanu Sankara Rao, K., Mannan, S.L., Raghavan, K.S., 1991. *Int. J. Fat.*, vol. 13, p. 471.

Srinivasan, V. S., Nagesha, A., Valsan, M., Bhanu Sankara Rao, K., Mannan, S. L., Sastry, D. H., 1999. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, vol. 76, p. 863.

Srinivasana, V.S., Valsana, M., Sandhyaa, R., Bhanu Sankara Raoa, K ., Mannana, S.L., Sastryb, D.H., 1999. *Int. J. Fat.*, vol. 21, p. 11.

Strudel, J.L. 1979. *Dislocations et déformation plastique*. Yrivals.

Tavassoli, A.A., 1986. *Phil. Mag. A*, vol. 54, p. 521.

Van den Beukel, A., 1980. *Acta Metall.*, vol. 28, p. 965.

Wood, D. S., Wynn, J., Baldwin, A. B., O'Riordan, P., 1980. *Fat. Eng. Mat. Struct.*, vol. 3, p. 39

II. Prédiction du comportement cyclique à température ambiante des polycristaux à structure CFC : modèles à champs moyens.

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à la modélisation du comportement cyclique des polycristaux à structure cubique à faces centrées (CFC), et en particulier de l'acier austénitique inoxydable 316L, en fatigue pure à température ambiante, en utilisant des modèles d'homogénéisation à champs moyens associés à des lois de plasticité cristalline.

Le choix des lois cristallines utilisées est basé sur des données et des observations expérimentales reliant les microstructures développées en fatigue pure à l'orientation cristalline. Les paramètres des lois cristallines adoptées ont été identifiés à partir de courbes cycliques expérimentales obtenues sur monocristaux, issues de la littérature.

Deux approches d'homogénéisation à champs moyens ont été adoptées afin d'assurer la transition de l'échelle locale (celle du grain) à l'échelle macroscopique : le modèle thermo-élastique de Kröner et la loi incrémentale proposée par Hill-Hutchinson. En plus des courbes d'écrouissage cyclique, les distributions des contraintes et des déformations plastiques moyennes par grain ont également été prédites et analysées. Les performances des deux approches ont été étudiées en comparant les prédictions avec les résultats des calculs par éléments finis sur de larges agrégats ainsi qu'aux données expérimentales disponibles dans la littérature. Différents types de sollicitations cycliques ont été étudiés.

1. Introduction

In a general point of view, the aim of mean-field homogenization approaches is the estimation of the macroscopic behaviour of a heterogeneous material from the properties of its different constituents. The homogenization procedure consists in substituting the real (heterogeneous) material by an equivalent homogeneous one having the same macroscopic structure and properties. The local fields are related to the macroscopic ones via a localization rule which describes the nature of interactions between a given constituent and the surrounding matrix. Finally the macroscopic effective behaviour is determined by an average operation over all the constituents.

Mean-field homogenization models have been widely used to deduce the mechanical behaviour of polycrystalline metals and alloys from the knowledge of the slip mechanisms occurring in the single crystal. These approaches have been pioneered by the classical works of Sachs (Sachs, 1928) and Taylor (Taylor, 1938). In the Sachs model, the polycrystal is assumed to be composed of parallel single crystals and the interaction between grains is ignored. In his approach, Sachs supposes that the total deformation in the tension direction is the same in all the grains composing the aggregate whereas the other elements of the deformation tensor can vary from one grain to another, and assumes that in each grain, a unique slip system is activated, the one with the highest Schmid Factor (Berveiller et al., 1972). Several studies concerning copper show that the Sachs model leads to a reasonable prediction at low plastic strains, for which only one slip system is activated (Mughrabi and Wang, 1988). However, for other materials such as the 316L austenitic stainless steel, the Sachs model greatly underestimates the macroscopic behaviour (Gorlier, 1984). In order to satisfy the strain compatibility conditions ignored in the Sachs model, the Taylor model prescribes the same plastic strain tensor in all the grains composing the aggregate which is equal to the macroscopic one. In this condition, the activation of five slip systems per grain is usually required to accommodate the plastic strain but equilibrium conditions are violated. In addition, in the vicinity of the yield stress, there are rarely five active slip systems per grain and the compatibility conditions can be satisfied by pure elastic strains (Berveiller et al., 1972).

Used to predict the macroscopic cyclic behaviour of several polycrystals, with different SFE, both Sachs and Taylor models do not lead to reasonable approximations of the experimental data [(Lukas and Kunz, 1996), (Gorlier, 1984) and (Sauzay, 2009)]. In fact, the two models ignore either grain boundary compatibility or equilibrium conditions and do not take into account enough realistic stress/strain heterogeneities occurring during elastic-plastic deformation.

The solution proposed by Eshelby (1957) for an ellipsoidal inclusion embedded in a linear elastic matrix allowed the generation of new mean-field homogenization models, called the self-consistent models. The first self-consistent approach was proposed by Kröner (1961). In this scheme, each grain is considered as an inclusion embedded in an infinite homogeneous matrix representing the polycrystal. Knowing the single crystal behaviour, the macroscopic one can then be deduced thanks to the thermoelastic Eshelby interaction law and an average procedure. However, the Kröner scheme is based on a fully elastic interaction between a grain and the matrix which is a stiff condition in the elastic-plastic regime. Therefore, it overestimates the internal stresses and neglects the plastic accommodation processes between the grain and the matrix which leads to a large overestimation of the macroscopic behaviour (Berveiller and Zaoui, 1978). A new version of the self-consistent

approach was proposed by Hill (1965) and implemented by Hutchinson (1970) which allowed the introduction of the elastic-plastic interactions between the grains and the matrix using an incremental formulation of the localization law. Hutchinson (1970) and Berveiller and Zaoui (1979) showed that the incremental model takes into account in a better way the plastic interactions between the grain and the matrix and leads to softer predictions than those obtained by the Kröner's one. For the case of proportional monotonic loadings, spherical inclusions and homogeneous isotropic elasticity, Berveiller and Zaoui (1979) deduced from the Kröner's scheme an explicit interaction law by introducing a corrective accommodation function, depending on plastic strain via the secant moduli. Barbe et al. (2001a) and Quilici et al. (1999) compared the curves computed using the Berveiller-Zaoui formulation and those provided by finite element calculations carried out on large aggregates. The agreement is rather correct concerning the global stress-strain behaviour as well as the averaged values for each grain. Sauzay (2008) used the Berveiller-Zaoui model in order to analytically model the intragranular backstresses due to deformation induced dislocations microstructures appearing in FCC metals and alloys under tensile/cyclic loadings. The predicted backstress values are in rather reasonable agreement when compared to a number of experimentally measured backstresses values.

Even if this secant formulation leads to softer predictions compared to the Kröner's one, the predicted stresses remain too large due to the linear dependency of the accommodation function with respect to the plastic strains (Hlilou et al., 2009). Thus, a new phenomenological approach, called also the β -model, has been proposed by Cailletaud and Pilvin ([Pilvin, 1990], [Cailletaud and Pilvin, 1994]), where the accommodation is ensured by the introduction of a phenomenological variable β which dependency with respect to plastic strain is non-linear. The β -rule can be easily adapted to cyclic loadings and can be adjusted so that it coincides with Berveiller-Zaoui's approach in the case of monotonic loadings. Evrard et al. (2008) have pointed out the good capabilities of the β -model to predict the macroscopic behaviour of a duplex stainless steel under non-proportional loading paths. Gérard et al. (2009) compared the macroscopic response predicted by both the β -model and the Kröner's one with finite elements calculations carried out on large aggregates and experimental data. They showed that the β -model provides rather correct predictions for various loading paths while the Kröner model overestimates the macroscopic stress levels. Hlilou et al. (2009) developed a generalization of the Cailletaud-Pilvin model in order to accurately predict the stress and strain fields at the grain level. This modification led to satisfactory results, compared to finite element calculations, whether at the global level or at the grain scale. Nevertheless, the adjustment of an elevated number of material parameters is required and the scale transition rule is calibrated by the adjustment of two additional constants, which are not free material parameters (Gérard et al., 2009).

For non-linear viscoplastic materials, Molinari et al. (1987) proposed a non-incremental self-consistent scheme based on a non-incremental tangent formulation of the non-linear matrix behavior. Lebensohn and Tomé (1993) used this approach for predicting the texture development and the plastic response of Zirconium alloys. Later, Molinari and Toth (1994) modified the tangent model by introducing a new scalar parameter in the interaction law. Then, this parameter was tuned using the results of finite element calculations carried out by Gilormini and Germain (1987) for the case of viscoplastic spherical inclusion embedded into an infinite viscoplastic matrix. This simple modification allowed a better description of the experimental behavior of polycrystalline copper, compared to the Taylor predictions or the basic tangent model. More recently, the basic tangent

formulation has been validated by Molinari et al. (2004) for a rigid viscoplastic inclusion embedded in a viscoplastic matrix. The predicted average strain rate in the inclusion has been compared to finite elements results ([Gilormini and Germain, 1987) and (Gilormini and Michel, 1999)]) and a fair agreement was noticed for different inclusion shapes and loading conditions. Masson et al. (2000) proposed a new affine formulation for nonlinear elasticity and viscosity, based on a linear thermoelastic comparison medium. Applied to power-law creeping FCC polycrystals, the affine scheme offered satisfactory predictions compared to incremental and tangent ones.

To deal with elastic-viscoplastic materials, Zouhal et al. (1995) and Toth et al. (2000) employed the elastic-viscoplastic Taylor-Lin model to simulate the cyclic behaviour of polycrystalline metals. The Taylor-Lin model is an extension of the (rigid plastic) Taylor model which includes elastic strains. It have been shown that taking into account the elastic deformations of the grains leads to a drastic diminution of the crystallographic slip activity, which drops near to single slip when the stress-strain is stabilised (Zouhal et al., 1996). The comparison with the experimental results of Liu et al. (1994) showed that the predicted single slip interval coincides with the interval where persistent slip bands are observed experimentally (Toth et al., 2000). Nevertheless, the Lin-Taylor model seems to considerably overestimate the macroscopic stress amplitudes for polycrystalline copper (Zouhal et al., 1996). A new elastic-viscoplastic interaction law have been proposed by Kouddane et al. (1993) and generalized by Molinari et al. (1997) for full anisotropy and elastic compressibility. This interaction law has been validated by Mercier et al. (2005). Both the matrix and the inclusion had elastic viscoplastic Maxwell behaviour, and various monotonic/non-monotonic deformation paths and inclusion shapes have been considered. A good agreement with finite elements results was observed, concerning time evolution of the average equivalent plastic strain rate inside the inclusion, the total strain rate and the equivalent von Mises stress.

If the models mentioned above allow the prediction of the effective macroscopic behavior as well as the inter-orientation strain/stress distributions, they exhibit many limitations and lead to large diverging predictions especially in the case of strongly non-linear and/or anisotropic crystal behavior (Lebensohn et al., 2004). In addition, some of these “classical” approaches, such as the incremental and the basic secant models, do not take into account the intra-orientation stress/strain fluctuation since the local moduli are assumed uniform inside an individual phase.

In order to introduce the intra-orientation fluctuations effects in polycrystalline modeling, a more general theory of the secant formulation has been proposed by Suquet (1995). It is based on the use of the stress or strain second moments in each individual phase to calculate the intra-orientation fluctuation covariance (Lebensohn et al., 2004).

Ponte Castaneda proposed a new rigorous homogenization method, called the second-order procedure ([Ponte Castañeda, 2002] and [Liu and Ponte Castañeda, 2004]), which is based on the use of the second-order Taylor approximation of the phase potentials. The main advantage of this method is the generation of the effective behaviour estimates that are exact to second-order and the accessibility to the average fields as well as to the field fluctuations within the grains with the same orientation (intra-orientation heterogeneities). In their work, Lebensohn et al. (2004) studied the accuracy of different mean field schemes using a full-field approach based on the fast Fourier transform (FFT) algorithm, originally proposed by Moulinec and Suquet (1998). For linear viscoplastic polycrystals, either for the effective behaviour or for the field fluctuations, the self-consistent

estimates match rather well with the FFT calculations provided the grains anisotropy is not too strong. When nonlinear viscous polycrystals are considered, the affine and the second-order models lead to the best agreement with the FFT simulations compared with the incremental, tangent and variational self-consistent approaches. Lebensohn et al. (2012) proposed a small-strain version of the FFT method to predict the micromechanical fields in polycrystalline materials deforming in the elasto-viscoplastic regime. The interest of this formulation is to allow a better interpretation of experimental data such as neutron diffraction measurements of internal lattice (elastic) strains and correlation of texture and microstructure with lattice strains.

As it can be noticed following this short review, the number of studies concerning the validation of the existing self-consistent models for monotonic loading is rather significant. Nevertheless, to our knowledge, no extensive study has been carried out concerning the accuracy of the self-consistent models in predicting the global behaviour as well as the distributions of the mean grain stress and plastic strain for elastic-plastic polycrystals under cyclic loading. Modelling the complex phenomena occurring during cyclic loading requires a good understanding of the different interaction mechanisms at the inter-granular scale as well as a deep knowledge of the heterogeneous deformation-induced microstructures at the intra-granular scale (Feaugas, 2003). The macroscopic cyclic behaviour is a result of the interaction and/or competition of different physical mechanisms (inter-granular/intra-granular back-stresses, isotropic stress...) which are uneasy to quantify but necessary for a fair description of both the macroscopic hysteresis loops and the cyclic stress-strain curves (CSSCs).

The aim of the present work is to study the ability of some self-consistent models in predicting the macroscopic cyclic behaviour of FCC polycrystals. For the sake of simplicity, viscosity effects are not considered in the present study. Attention will be paid to two self-consistent models in particular: the Kröner model for its simplicity and the incremental Hill-Hutchinson model which takes into account in a better way the strain accommodation between the grains and the matrix and may be adapted to cyclic loadings easily. The predicted macroscopic cyclic behaviour as well as the mean grain stress and plastic strain distributions are investigated. The accuracy of the two self-consistent models is discussed with respect to both finite element calculations carried out on large aggregates and experimental data, for different FCC polycrystals exhibiting different stacking fault energy (SFE) values (316L austenitic stainless steel, Copper, Nickel and Aluminium).

2. Description of the whole model

2.1. Effect of grain size

The homogenization models, used in this work, do not take into account any grain size effect on the predicted macroscopic behaviour since no characteristic length will be introduced. Indeed, for conventional grain-sized metallic polycrystals (grain size higher than $1\mu\text{m}$), the cyclic stress-strain curves seem to be weakly affected by the grain size. The experimental investigations undertaken by Mughrabi and Wang on texture-free copper polycrystals (Mughrabi and Wang, 1988) possessing different grain sizes ($25\text{-}400\mu\text{m}$), show that the grain size has no influence on the cyclic behaviour of the polycrystal. Similar results have been reported by Buque et al. (2001b) and Lukas and Kunz (1987) for polycrystalline nickel and copper respectively. Haddou et al. (2004) observed a grain size effect for nickel but essentially at low plastic strain amplitudes (lower than 10^{-4}). This weak effect may be

explained by the formation of a typical deformation-induced microstructure during cyclic deformation, composed of characteristic dislocation arrangements (PSBs, veins/channels, labyrinths, cells...), whose characteristic sizes are much smaller than conventional grain size and thus independent of it ([Holste, 2004], [Li et al., 2011]). Therefore, the grain size effect observed at low plastic strain amplitudes (Haddou et al., 2004) may be explained by the lack of well-formed dislocation microstructures. In addition, the dependence of the cyclic behaviour on grain size may be biased by texture resulting from thermal treatments applied for modifying grain size ([Morrison, 1994], [Peralta et al., 1995]). Indeed, The texture effect appears to be even greater than the grain size effect on the cyclic behaviour of polycrystalline copper (Peralta et al., 1995) and leads to additional hardening for both nickel and copper polycrystals ([Morrison, 1994], [Morrison and Moosbrugger, 1997], [Cartensen and Pedersen, 1997], [Zhang and Jiang, 2006]).

A grain size effect is observed in planar-slip alloys such as Cu-30%Zn which does not exhibit any patterned microstructure during cyclic loading (for a review, see Sauzay and Kubin, 2011). In this case, the ladder-like microstructure is not observed ([Wang and Margolin, 1895], [Wang, 2005]). Dislocation pile-ups, planar loops and tangles or dislocation accumulation close to the grain boundaries seem to be more efficient inducing a strong grain size effect.

In order to evaluate if grain size effect may be neglected, experimental data measured by various authors using different grains sizes for copper and nickel polycrystals are plotted in FIG.II-1 and FIG.II-2, respectively. In order to discuss the grain size effect independently of the texture one, only data obtained on free-texture polycrystals are considered. For plastic strain amplitudes higher than $5 \cdot 10^{-4}$ and for either small ($< 80 \mu\text{m}$) or large ($> 85 \mu\text{m}$ for copper and $> 250 \mu\text{m}$ for nickel) grains sizes, the difference between the measured stress amplitudes is lower than 10 MPa with a relative difference lower than 7%. This holds true for copper polycrystal even for lower plastic strain amplitudes (FIG.II-2). For nickel polycrystal, the grain size effect seems to be more pronounced than for copper at plastic strain amplitudes lower than $5 \cdot 10^{-4}$. Indeed, the macroscopic stress amplitudes are higher for small grain sizes with a relative difference of about 15%. These results are in agreement with those obtained by Haddou et al. (2004) even though the polycrystals studied by these authors displayed moderate $\langle 111 \rangle$ textures. Following these conclusions, it is reasonable to neglect the grain size effect on the cyclic stress-strain curves of FCC polycrystals, for intermediate to large plastic strain amplitudes and medium to large SFEs. Therefore, the constitutive laws used in this study do not take into account the grain size effect, and thus, the predicted CSS curves should be compared to experimental data measured, either for large grain sizes whatever the plastic strain or for intermediate to large plastic strain amplitudes whatever the grain size.

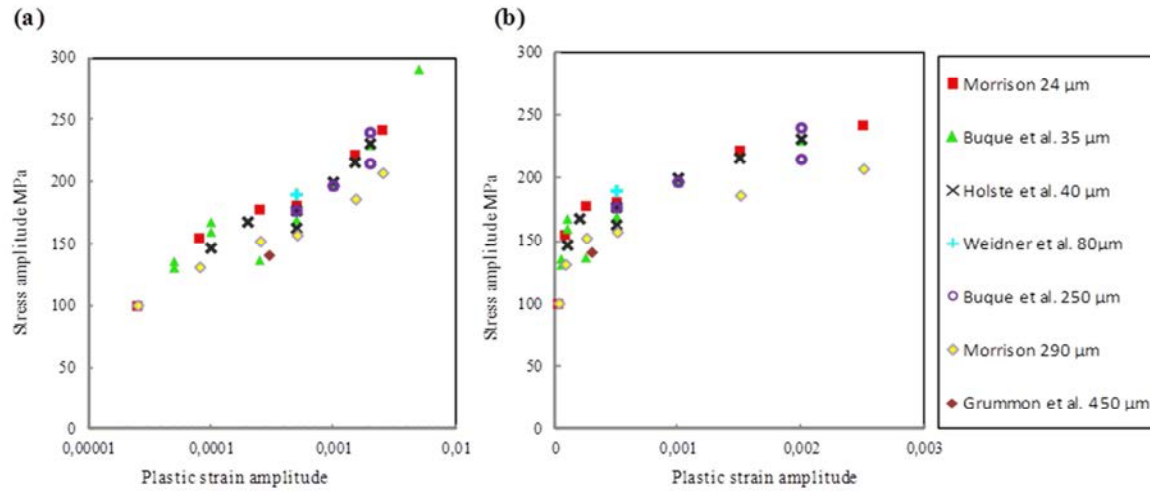


FIG.II-1: Nickel polycrystalline CSS curves reported by a number of authors for various grain sizes: (a) logarithm scale; and (b) linear scale.

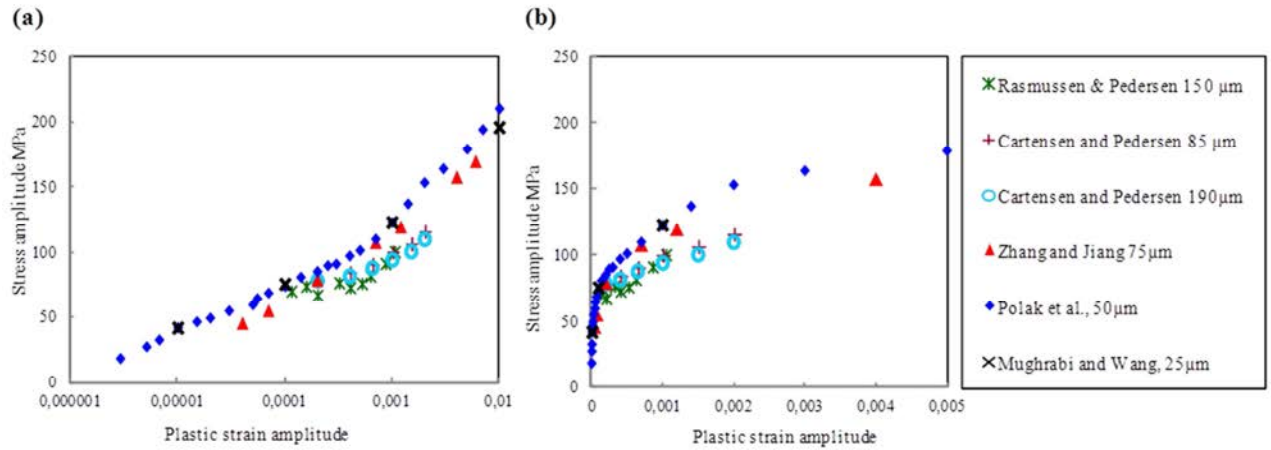


FIG. II-2: Copper polycrystalline CSS curves reported by a number of authors for various grain sizes: (a) logarithm scale; and (b) linear scale.

2.2. Description of the homogenization schemes

In the present study, both the Kröner and the Hill-Hutchinson models are used in order to predict the macroscopic cyclic behaviour of face-centered cubic polycrystals.

Both the Kröner and the Hill-Hutchinson self-consistent models are based on the solution proposed by Eshelby for the problem of an ellipsoidal inclusion embedded in an infinite medium. Each grain of the polycrystal is considered as a spherical inclusion in interaction with a homogeneous matrix representing the aggregate. The two models describe the polycrystal as a set of crystallographic phases where each phase is made of grains having the same crystallographic orientation. Each phase is then characterized by a volume fraction and a set of Euler angles. The consistency lies in the fact

that each inclusion is in interaction with a matrix having the same moduli as the macroscopic investigated ones. These moduli may be elastic, incremental, secant...

In the Hill-Hutchinson model, the transition from the local scale to the macroscopic one is ensured by a localization rule which can be written in terms of increments as below:

$$\underline{d\sigma} - \underline{d\Sigma} = \underline{\underline{L}}^* : (\underline{dE} - \underline{d\varepsilon}) \quad (II.1)$$

Where $\underline{d\sigma}$ and $\underline{d\varepsilon}$ are the stress and the strain tensor increments in the grain and $\underline{d\Sigma}$ and \underline{dE} are the same quantities for the polycrystal. $\underline{\underline{L}}^*$ is the Hill "constraint" tensor associated to the 4th order tensor of the overall incremental moduli of the aggregate $\underline{\underline{L}}$:

$$\underline{\underline{L}} = \left\langle \underline{\underline{l}} \left(\underline{\underline{l}} + \underline{\underline{L}}^* \right)^{-1} \left(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{L}}^* \right) \right\rangle$$

$\underline{\underline{l}}$ is the tensor of the incremental moduli of a given grain and $\langle . \rangle$ denotes the average over the volume of the aggregate.

In the case of spherical phases, isotropic homogeneous elasticity and tension (compression) loadings, this interaction law has a simplified expression, given by (Berveiller and Zaoui, 1979):

$$\underline{d\sigma} = \underline{d\Sigma} + \frac{2\mu\mu'(7-5\nu')}{\mu'(7-5\nu') + 2\mu(4-5\nu')} (\underline{dE^p} - \underline{d\varepsilon^p}) \quad (II.2)$$

Where:

$$\nu' = \frac{\nu + \frac{2\mu}{3}(1+\nu)f}{\nu + \frac{4\mu}{3}(1+\nu)f}, \quad \mu' = \frac{\mu}{1+2\mu f} \quad \text{and} \quad f = \frac{3}{2} \frac{dE^p}{d\Sigma}$$

In the above equations, μ is the shear modulus, ν is the Poisson's ratio, $\underline{d\sigma}$ and $\underline{d\Sigma}$ are respectively the increments of the local and the macroscopic stress tensors, $\underline{d\varepsilon^p}$ and $\underline{dE^p}$ are respectively the increments of the local and the macroscopic plastic strain tensors, μ' and ν' are respectively the incremental elastic-plastic shear modulus and Poisson's ratio. The introduction of the ratio f allows the introduction of the elastic-plastic behaviour of the polycrystal in the localization rule.

The Kröner's localization rule can be easily deduced from the Hill's one by taking $f = 0$, which corresponds to an elastic interaction between the grains and the matrix. Therefore, the Kröner interaction law can be written as follows:

$$\underline{d\sigma} = \underline{d\Sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{dE^p} - \underline{d\varepsilon^p}) \quad (II.3)$$

$$\text{With } \beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)} \quad (\text{Berveiller and Zaoui, 1979})$$

2.3. Constitutive laws and parameters adjustment

Independently of crystalline plasticity laws, the elastic behaviour is defined through three elastic constants, which unit is the stress one, C_{11} , C_{12} and C_{44} , which values can be found for the four studied polycrystals in (Sauzay, 2007). When applying mean-field homogenization procedures, only the case of homogeneous and isotropic elasticity is considered. Two isotropic parameters are thus used, the Young's modulus, Y , and the Poisson ratio, ν , which are assumed to be the same in the matrix and each individual grain.

Concerning crystalline plasticity laws, two main families of constitutive models can be distinguished in the literature: physically-based models and phenomenological ones.

The physically-based models rely on the use of internal variables based on dislocation densities, considered as the most important microstructural parameters to describe plasticity mechanisms. In most of these models, the flow rule is based on the Orowan relation and the elastic-plastic yield stress is calculated from the evolution of dislocation densities. In this category, one can find the Mecking and Kocks model (Mecking and Kocks, 1981) which links the macroscopic flow stress with the total dislocation density through an empirical relation using the Taylor factor. In the Tabourot (Tabourot et al., 1997) model, the critical shear stress is linked to the dislocation density on each slip system via an interaction matrix, introduced by Franciosi (Franciosi, 1985) which describes the interaction nature between the different slip systems. This model allows a rather good prediction of copper single crystal behaviour but only in monotonic loadings. Déprés (Déprés et al., 2008) proposed a modified version of the Tabourot-Teodosiu model for cyclic loading, whose results are in good agreement with respect to DDD simulations. Feaugas and Pilvin (Feaugas and Pilvin, 2009) distinguish in their model two phases in correlation with TEM observations: a hard phase corresponding to very dense regions (walls) and a soft phase corresponding to dislocation free areas (channels). The hardening of each activated slip system and each phase is described by the evolution of different kinds of dislocation densities (mobile, polarized and dipolar dislocations) and the critical shear stress is linked to the dislocation densities using the Taylor's relation. This model allows a fair description of tensile and cyclic hardening as well as the plastic strain irreversibility associated with the ratcheting process.

As for the phenomenological constitutive models, they mostly use a critical resolved shear stress as state variable for each slip system (Roters et al., 2010). The main strength of these models, with respect to the physically-based ones, is their better predictions in cyclic and complex loadings due to the use of adjustable parameters. In this category, one can find the Peirce model (Pierce et al., 1983), limited to monotonic loading and the Méric-Cailletaud (Méric and Cailletaud, 1991) which allows a good approximation either in cyclic loadings or complex ones.

The proposed model could be considered as a physically-based one. Despite the fact that our modelling uses a phenomenological description of the kinematic hardening, only two adjustable parameters are used and the crystalline plasticity laws are adjusted using the CSS curves of single crystals only. The choice of the crystalline constitutive laws is based on many experimental observations, available in the literature, correlating the cyclic behaviour and the dislocation patterns observed in the single crystals with their corresponding orientations.

Since we are interested in FCC polycrystals, twelve slip systems are considered. Crystalline plasticity laws are defined on each slip system through two variables, the kinematic and the isotropic stresses, and a slip criterion. The kinematic stress corresponds to long range stresses and results in the translation of the elasticity domain. It depends on the slip direction and is induced by plastic strain heterogeneities occurring at the scale of the polycrystal (inter-granular heterogeneities) and at the scale of the grain (intra-granular heterogeneities) (Feaugas and Pilvin, 2009). Concerning the isotropic stress (friction stress), it corresponds to short range stress and results in an expansion of the elasticity domain. The friction stress is independent of the straining direction and can be induced by dislocation-dislocation or dislocation-solid solution interactions for instance.

The investigation of experimental hysteresis loops of single crystals oriented for single slip (copper (Cheng and Laird, 1981), nickel (Jia et al., 2008) and 316L austenitic stainless steel (Li and Laird, 1994)) showed that, at the saturation stage, the cyclic hardening is mainly due to the contribution of the kinematic hardening while the saturated isotropic stress remains nearly independent of the applied plastic strain. In this study, the evolution of the kinematic hardening is described by an Armstrong-Frederick nonlinear type law (1), which allows a rather fair description of the non-linearity of the crystal CSSCs. This basic kinematic hardening rule, first proposed by Armstrong and Frederick (1966), was extended by Chaboche et al. (1979, 2008) to improve predicting materials behaviour under complex loadings and simulating experimentally observed phenomena such as ratchetting ([Bari and Hassan, 2002], [Jiang and Kurath, 1995]). The modification of the Armstrong-Frederick hardening relation proposed by Chaboche et al. (1979) consists in decomposing the backstress into a number of additive parts and every part follows the Armstrong-Frederick rule. This modified formulation seems to provide reasonable predictions of the cyclic hardening, the cyclic softening, ratchetting and stress relaxation for both uniaxial and multiaxial loadings ([Jiang and Kurath, 1995], [Krishna et al., 2009]).

In this study, since we are interested in predicting the cyclic behaviour of FCC polycrystals under proportional loading only and in order to avoid dealing with a consequent number of adjustable parameters, only one A-F rule is used (II.4).

For each slip system i ($i=1, 12$), the increment of the kinematic resolved shear stress, dx_i is expressed as:

$$dx_i = \frac{2}{3} C d\gamma_i^p - \alpha x_i |d\gamma_i^p| \quad (II.4)$$

Where $d\gamma_i^p$ is the increment of the plastic slip for the i th slip system, C and α are the material parameters to be adjusted.

The evolution of the plastic strain rate with the shear stress is described by a viscoplastic power-law. The choice of such a law is a trick so that problems related to numerical convergence could be avoided. The adjustment of the viscoplastic parameters are made in such a way that the effect of plastic strain rate on the predicted macroscopic behaviour remains negligible as it is expected for FCC polycrystals at room temperature. The values of 100 and 0.00001 were chosen for n and $\dot{\gamma}_0$ respectively.

The choice of the evolution law of the isotropic hardening will be made in a manner to highlight the effect of three different slip mechanisms: allowed secondary slip, pure single slip and distinguishing two orientation populations.

For each slip system i , the general expression of the isotropic stress is given by:

$$\dot{\tau}_i^c = H_0 \sum_{j=1}^{12} a_{ij} |\dot{\gamma}_j^p| \quad \text{with } a_{ij} = q \text{ for } j \neq i \text{ and } a_{ii} = 1$$

Where H_0 the isotropic hardening modulus, q is the latent hardening coefficient and τ_i^0 is the initial critical shear stress on the i^{th} slip system. In what follows, the isotropic shear stress is taken to be the same for all slip systems and equal to the initial critical shear stress τ_0 .

The parameters of the crystalline model are adjusted using experimental cyclic stress-strain curves of single crystals only, provided by the literature.

2.3.1. *Single slip with secondary slip possibility*

In this part, the crystalline constitutive laws are adjusted using the experimental stress-strain curves of crystals oriented for single slip and secondary slip is allowed. This assumption is commonly used for modelling polycrystalline behaviour (see for instance [Gérard et al., 2009] and [Hlilou et al., 2009]). Crystals oriented for single slip are characterized by a high Schmid factor value (~ 0.5) and the development of parallel persistent slip bands during cyclic deformation. When cycled at low plastic strain, the well-oriented grains are the first to be plastically activated which is not the case of grains oriented for multiple slip. Experimental studies held on nickel ([Blochwitz and Veit, 1982] and [Mecke and Blochwitz, 1982]) and copper (Cheng and Laird, 1981) show that all the grains oriented for single slip present the same CSS curves which justifies the use of the unique CSSCs of well-oriented crystals (Schmid factor of 0.5) for the adjustment of the crystalline plasticity laws parameters.

In this simple case, only one slip system is activated per grain, the equation (II.4) can be analytically integrated and the dependence of the saturation resolved shear stress amplitude with respect to the plastic slip amplitude on the slip system is given by:

$$\tau_i = \tau_0 + \frac{2}{3} \frac{c}{\alpha} \tanh(\alpha \gamma_i^p) \quad (\text{II.5})$$

Thus, three parameters C , α and τ_0 should be adjusted using experimental data.

2.3.2. *Effect of imposed single slip*

Several observations reported in the literature show that, for plastic strain amplitudes lower than 2.10-3, only one slip system is activated per grain and most of grains exhibit PSBs quasi-exclusively. This tendency to single slip is observed even for metals with very high SFE like aluminum (Videm and Ryum, 1996) and nickel (Buque et al., 2001). Similar single slip microstructures were reported in lower SFE materials such as 316L (Obtlik et al., 1994) and copper ([Rasmussen and Pedersen, 1980], [Mughrabi and Wang, 1988]). The activation of secondary slip is not totally excluded, as shown by the TEM observations of Zhai et al. (1996) concerning aluminium, but remains very limited.

In this part, single slip is imposed to all grains composing the aggregate. Well-oriented grains are chosen for parameter adjustment. According to experimental results based on the partition of hysteresis loops (Cheng and Laird, 1981), which shows that the saturated isotropic stress is almost independent of plastic strain range, a very low value is chosen for the isotropic self-hardening coefficient ($H_0 \approx 1\text{MPa}$). However a very high value is attributed to the latent isotropic hardening coefficient ($q=10^5$) in order to prevent any multiple slip to occur and thus impose single slip. In fact, primary plastic slip will induce under this condition so strong hardening on the secondary slip system so that only single slip can occur in both single crystals and grains oriented for single slip.

2.3.3. Partition into two orientation families

Both of the models discussed above neglect the effect of grains oriented for multiple slip. However, many studies showed that crystals oriented for multiple slip, such as $\langle 100 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$, exhibit a stronger hardening compared to those oriented for single slip and their CSS curves do not show any plateau behaviour even at large plastic strain. In FIG.II-3 are represented the cyclic deformation-induced dislocation arrangements corresponding to the summit orientations of the standard triangle. A labyrinth-like microstructure appears in copper ([Li et al., 2009] and [Jin and Winter, 1984]), nickel ([Buque et al., 2001a] and [Buque et al., 2001b]), austenitic stainless steel (Boulanger et al., 1985) and aluminium (Videm and Ryum, 1996b) single crystals loaded along a $\langle 100 \rangle$ direction. The $\langle 111 \rangle$ orientation is characterized by a cell/walls arrangements. Both of these microstructures differ from the PSBs observed in single crystals oriented for single slip. In addition, the introduction of grains oriented for multiple slip should allow a better accommodation of the plastic strain between grains which is not the case of pure single slip model, where all the grains are constraint to deform along a unique slip system even at high plastic strain amplitudes.

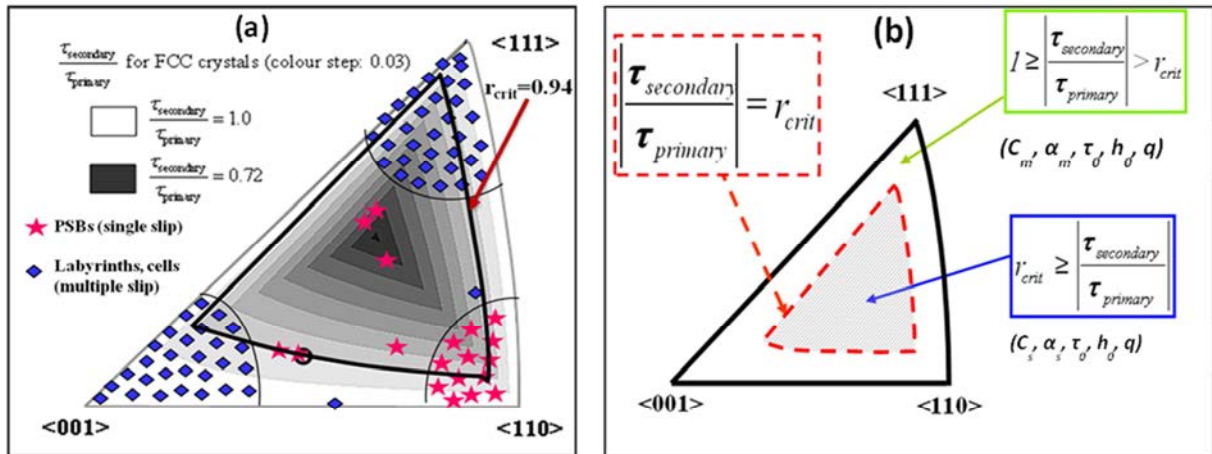


FIG. II-3: Partition of the standard crystallographic triangle into two orientation populations using the ratio $|\tau_s/\tau_p|$: (a) Orientation effect on dislocation pattern for Nickel (T. Kruml, IPM, Brno); (b) The standard triangle partition used in the proposed plasticity laws.

To take into account the influence of grains oriented for multiple slip, we followed the idea suggested by Schwab and Holste (Schwab and Holste, 2002) who tried to predict the macroscopic cyclic behaviour of nickel polycrystals using a modified formulation of either Taylor or Sachs models, combined to a partition of the standard triangle into different groups of orientations, following the

observed dislocation patterns. Four areas have been defined and each area corresponds to a group of crystalline orientations. The same set of parameters is then assigned to grains belonging to the same area.

In the following work, for the sake of simplicity and because of the lack of $\langle 111 \rangle$ data for 316L austenitic stainless steel and aluminum, the standard triangle is divided into two different areas only. Two families of orientations are then considered: the first one located in the central part of the triangle which gathers grains oriented for single slip and the second group located at the periphery of the standard triangle which is made of $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ and intermediate crystals (see FIG.II-3).

To distinguish between the two areas, a simple criterion is used: the ratio between the secondary resolved shear stress, τ_s , and the primary resolved shear stress, τ_p . As it is shown in FIG.II-3, grains located in the area where the ratio τ_s/τ_p is lower than a critical value R_{crit} , are considered as oriented for single slip (central zone). Grains located in the second domain are considered as oriented for multiple slip. Following the works of Cheng and Laird (1981), this ratio varies theoretically between 0.72 and 1 and is equal to 0.94 for well-oriented single crystals (Schmid factor of 0.5). The ratio is equal to 1 along the borders of the standard triangle. Therefore, the value of the critical ratio, defining the boundary between the two populations, must be higher than 0.94 and lower than 1. Following the TEM observations, the choice of a value very close to 1 would induce a wrong partition of the standard triangle where grains and crystals oriented for multiple slip experimentally would be located in the single slip domain (FIG.II-3). The choice of $R_{crit} = 0.95$ seems to be reasonable to make sure that grains to which single slip is imposed are located in the central zone and those oriented of multiple slip belong to the periphery of the triangle.

Two different sets of parameters should be adjusted as it is shown in FIG.II-3. For grains oriented for single slip, the parameters are identified using the CSSCs of well-oriented crystals. As for grains oriented for multiple slip, the experimental $\langle 100 \rangle$ crystal curves are used. The initial critical shear stress τ_0 and the isotropic hardening modulus H_0 are considered to be the same for both orientations. According to the hysteresis loops partitioning results of Cheng and Laird (1981), a very low value is chosen for the isotropic hardening modulus H_0 . Concerning the latent hardening coefficient q , its role consists on enabling or not multiple slip to occur, hence its importance. A q value of 1.4 is assigned to grains located at the periphery of the standard triangle in order to allow multiple slip to occur. This value is typically used in the literature to take into account the bit stronger latent hardening with respect to the self-hardening ($=1$) (Franciosi et al., 1980). However, this value does not induce stronger latent hardening and allows multiple slip to occur.

Concerning grains belonging to the central area, a very high value of q ($q=10^5$) is chosen so that only single slip can occur. Steckmeyer et al. (2012) have checked that the used q value prevents secondary slip in grains belonging to the single slip family. Using a q value ten times higher or lower does not change the predictions of the two self-consistent models and FE computations (Steckmeyer et al., 2012).

Finally, it should be noticed that the use of the maximum value of the critical ratio $R_{crit} = 1$ leads to impose single slip to all grains whatever their orientations, which correspond to the same situation discussed in 2.3.2. The use of a critical value $R_{crit} = 1$ and a low value of the latent hardening coefficient q ($q=1.4$) is identical to the situation discussed in 2.3.1.

2.3.4. Adjustment of the crystalline plasticity laws parameters

For the three cases detailed above, the cyclic plasticity parameters are identified by FE calculations using the experimental CSS curves of single crystals, found in the literature. In the case of allowed secondary slip and pure single slip, well-oriented single crystals are chosen ($\langle -149 \rangle$ for 316L austenitic stainless steel and nickel, $\langle -123 \rangle$ or $\langle -139 \rangle$ for copper and $\langle 123 \rangle$ for aluminium). Concerning the third model for which two families of orientations are considered, well-oriented single crystal curves are used for the adjustment of the central area parameters (grains oriented for single slip), the second set of parameters (multiple slip) is identified using the CSS curves of the $\langle 100 \rangle$ orientation, which have been found in the literature for all metals of concern. The two orientations families plasticity laws have been validated for the two other ST summit orientations which have not been used for parameter adjustment ([Sauzay et al., 2010] and [Steckmeyer et al., 2012]). For both $\langle 111 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ oriented single crystals, the predicted CSS curves are in fair agreement with experimental data.

FIG.II-4 represents the adjusted CSS curves for well oriented and $\langle 100 \rangle$ single crystals of copper. Experimental data can be found in (Mughrabi et al., 1978) and (Gong et al., 1997). The elasticity parameters as well as the set of the adjusted parameters for the three crystalline plasticity laws (secondary slip, pure single slip and multiple slip) and the four considered polycrystals are summarized in TAB.II-1, TAB.II-2, TAB.II-3 and TAB.II-4. As for the elastic moduli C_{11} , C_{12} and C_{44} used in the FE computations, they are available in (Sauzay, 2007).

In the present study, the predictions obtained by finite element calculations on large aggregates ([Steckmeyer et al., 2012] and [Sauzay et al., 2010]) are used as a reference in order to evaluate the accuracy of the Hill-Hutchinson and the Kröner self-consistent models. Therefore, the sets of plasticity law parameters used in the mean-field computations are the same as those used in the FE ones.

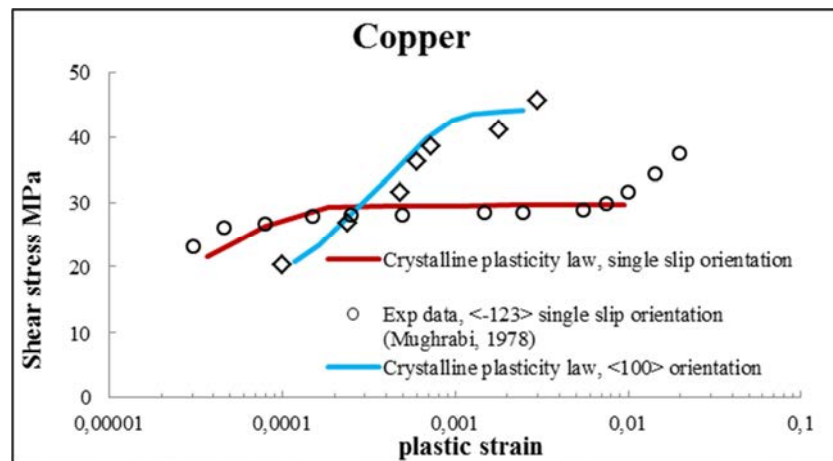


FIG. II-4: Experimental and adjusted cyclic stress strain curves for copper single crystals. The crystalline plasticity parameters for grains oriented for single slip were adjusted using CSS curves of crystal oriented for single slip. Those of grains oriented for multiple slip were identified using CSS curves of $\langle 100 \rangle$ crystals. Experimental data: Mughrabi et al. (1978), Gong et al. (1997).

	Young Modulus (MPa)	Poisson ratio
316L austenitic stainless steel	202000	0.3
Copper	120000	0.3
Nickel	214000	0.3
Aluminium	70000	0.3

TAB.II-1 : Elasticity constants at room temperature of the four studied polycrystals (isotropic elasticity)

Material	Slip mode	τ_0 (MPa)	C (MPa)	α	H_0 (MPa)	q
316L	secondary	57.5	9112.5	270	0	-
Cu	secondary	14	420000	20000	0	-
Ni	secondary	25	247500	5500	0	-
Al	secondary	1.8	5520	1200	0	-

TAB.II-2: Parameters of the crystalline cyclic plasticity laws allowing secondary slip, adjusted using the CSSCs of single crystals oriented for single slip. Choosing $H_0=1\text{MPa}$ and $q=1.4$ leads to similar results.

Material	Slip mode	τ_0 (MPa)	C (MPa)	α	H_0 (MPa)	q
316L	Single slip	50	9200	200	1	100000
Cu	Single slip	14	330000	15000	1	1000000
Ni	Single slip	32.5	150000	5000	1	2000000
Al	Single slip	1.8	2600	650	1	100000

TAB.II-3: Parameters of the crystalline cyclic plasticity laws imposing single slip, adjusted using the CSSCs of single crystals oriented for single slip.

Material	Area of ST	Slip mode	τ_0 (MPa)	C (MPa)	α	H_0 (MPa)	q
316L	Center	Single	50	9200	200	1	100000
	Periphery	Multiple	50	26600	38	1	1.4
Cu	Center	Single	14	330000	15000	1	1000000
	Periphery	Multiple	14	83600	1900	1	1.4
Ni	Center	Single	32.5	150000	5000	1	200000
	Periphery	Multiple	32.5	660000	11000	1	1.4
Al	Center	Single	1.8	2600	650	1	100000
	Periphery	Multiple	1.8	170000	20000	1	1.4

TAB.II-4 : Parameters of the crystalline cyclic plasticity laws, including two orientation families, adjusted using either the CSSCs of single crystals oriented for single slip and those of $\langle 100 \rangle$ oriented single crystals (multiple slip). The critical ratio is equal to 0.95.

3. Prediction of the macroscopic cyclic behavior

Calculations are carried out using the SiDoLo software (Pilvin, 2003). The Hill-Hutchinson and the Kröner localization rules as well as the previous crystalline constitutive laws have been implemented using FORTRAN subroutines. The different studied aggregates are composed of 40 grains of random orientations. Each grain represents a crystallographic orientation phase characterized by its fraction and a set of Euler angles. To justify the use of 40 grains only, simulations have been carried out on polycrystals composed of 40, 80 and 200 grains of random orientations and led to close results. FIG.II-5 presents the cyclic stress-strain curves obtained for 316L, using both the Hill-Hutchinson and the Kröner models with allowed secondary slip and imposed single slip. For the two slip conditions, the difference is lower than 4% for the Kröner model and 2% for the Hill-Hutchinson one. As for the simulation of the mean grain stress and plastic strain distributions, 80 grains are required for getting stable distributions with respect to the number of grains. The results discussed in what follows are obtained with total strain controlled conditions and a few cycles are necessary for reaching saturation of macroscopic stress as well as mean grain distributions.

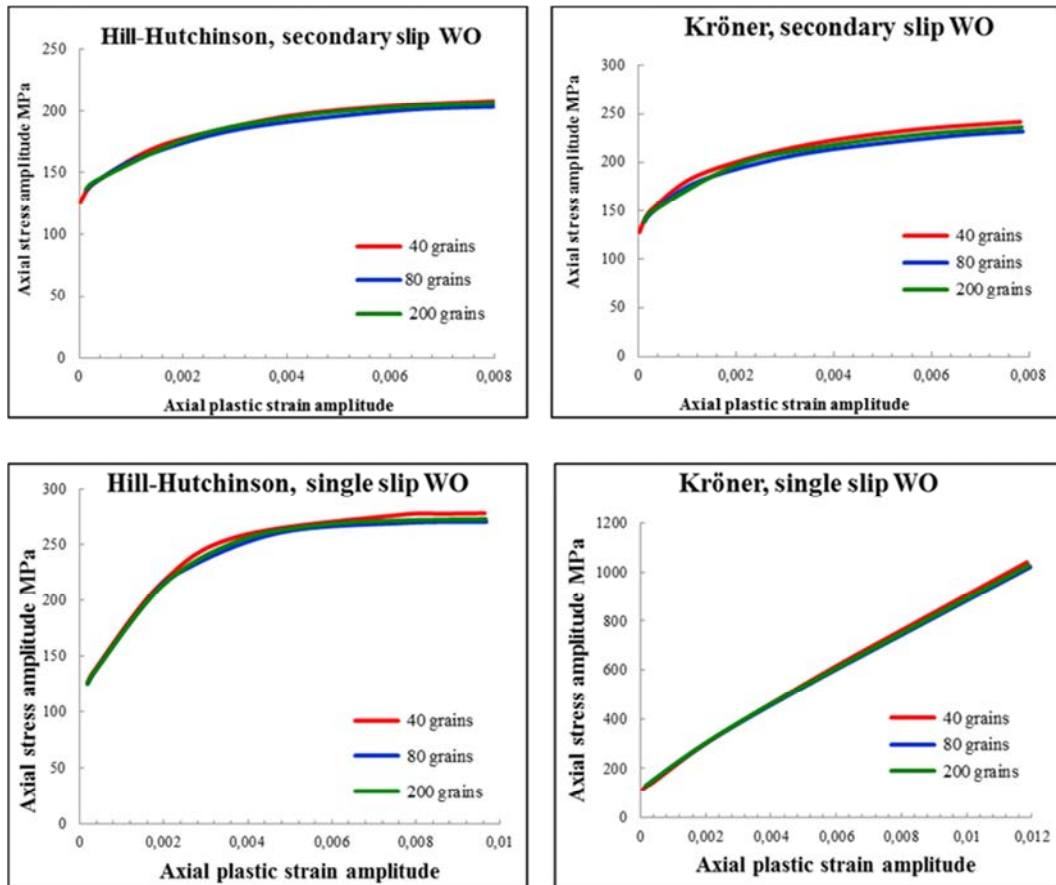


FIG. II-5: Comparison of the cyclic stress-strain responses of the Hill-Hutchinson and the Kröner models with allowed secondary slip and imposed single slip for three aggregates with different number of grains. 316L austenitic stainless steel.

3.1. Effect of secondary slip

The first part of this work consists in the study of a simple case, where the same set of parameters is assigned to all the grains composing the aggregate, neglecting any single slip/multiple slip orientation characteristic. These parameters are adjusted using the cyclic stress-strain curves (CSSCs) of well-oriented single crystals. Secondary slip is allowed in this part, in agreement with the majority of published plasticity laws.

FIG.II-6 represents the cyclic stress-strain curves computed for the 316L austenitic stainless steel, copper, nickel and aluminium using the Hill-Hutchinson and the Kröner models. Curves predicted by Finite Element computations are represented for comparison ([Steckmeyer et al., 2012]).

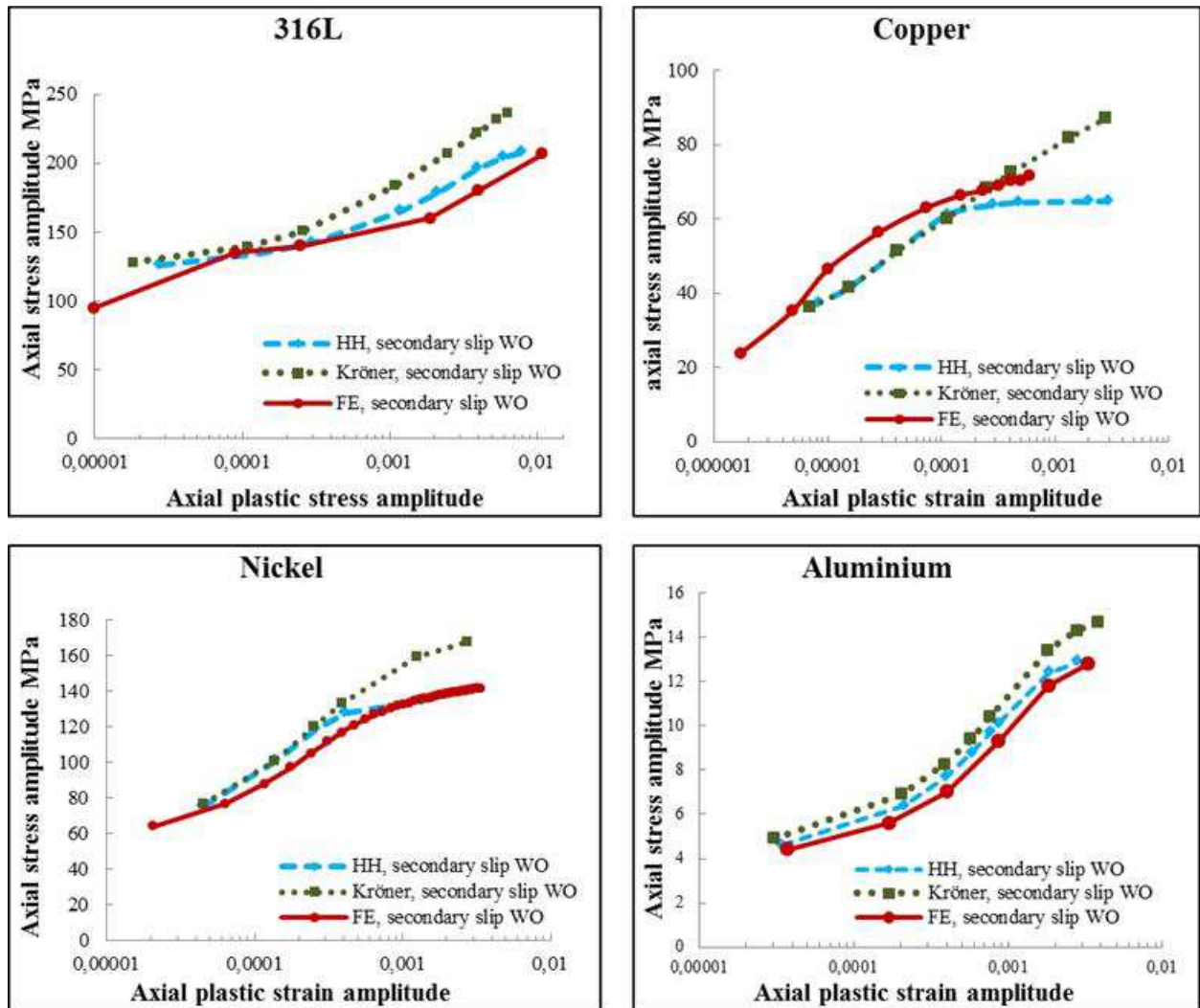


FIG. II-6: The polycrystalline CSS curves predicted by both the Hill-Hutchinson (HH) and the Kröner models, for different FCC polycrystals: 316 L, Ni, Al and Cu. Those obtained by Finite Elements calculations (FE) are presented for comparison ([Sauzay et al., 2010], [Steckmeyer et al., 2012]). Secondary slip is allowed and the CSSCs of well-oriented crystals (WO) have been used for parameters adjustment.

The CSS curves predicted by both the Hill-Hutchinson and the FE models are very close with a relative difference lower than 5% for Al, 8% for Ni, 10% for 316L and 15% for copper. As for the Kröner model, the computed macroscopic stresses are slightly higher than those of Hill-Hutchinson and FE ones and the difference increases with increasing plastic strain amplitudes, except for copper, for which the macroscopic stresses predicted by the FE method are higher than those obtained by the Kröner one for plastic strain amplitudes lower than 10^{-4} . For plastic strain amplitude of 4×10^{-4} , the relative error is about 17% for 316L, 2.8% for copper, 13.7% for nickel and 18% for aluminium. This means that the Kröner model leads to large overestimations even at low plastic strain in case of multiple slip, which is in agreement with results obtained by Gérard et al. (2009). The additional hardening predicted by the Kröner model can be explained by the nature of the localization rule which is based on an elastic interaction between each orientation (grain) and the matrix. This leads to a stiff accommodation of the plastic strain and thus to large internal stresses at the grain scale. The Hill-Hutchinson model seems to predict much more accurately the macroscopic cyclic response when secondary slip is favoured. In this case, the elastic-plastic interaction rule of the incremental model is more realistic allowing a better accommodation between the grains and the matrix, for the whole range of plastic strain: from a few 10^{-6} to 10^{-2} .

As shown in FIG.II-7 (a) and (b), the hysteresis loops predicted by the Hill-Hutchinson model for 316L are similar to those obtained by FE calculations. The shape and the axial stress peaks are accurately predicted. As for the Kröner model, it slightly overestimates the macroscopic stresses especially at high imposed strain amplitudes, but the shape is correctly produced.

Even if the Hill-Hutchinson model leads to reasonable results with respect to finite elements calculations, the two models lead to a considerable under-estimation of the macroscopic behaviour when compared to experimental data. The assumptions made in this section seem to be very simple and neglect physical hardening mechanisms occurring at the grain scale. In fact, as discussed in 2.4.2 and 2.4.3, imposing pure single slip in grains oriented for single slip or taking into account grains oriented for multiple slip could allow more accurate predictions of the macroscopic cyclic behaviour of FCC polycrystals.

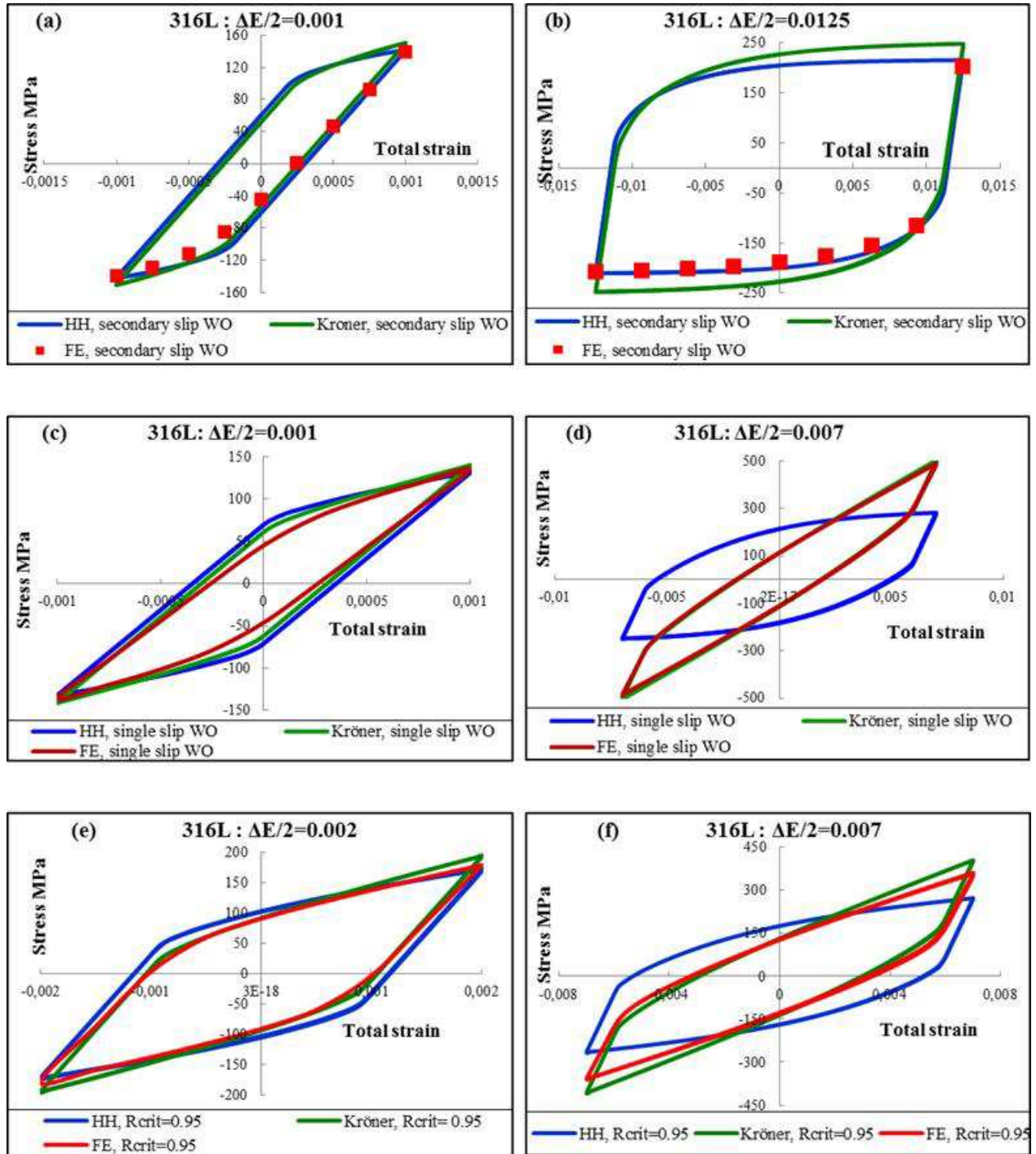


FIG. II-7: The hysteresis loops, predicted by the three models: Hill-Hutchinson (HH), Kröner and Finite Elements calculations (FE). Three plasticity laws can be distinguished: (a) and (b) for allowed secondary slip and identification using the CSSCs of well-oriented crystals (WO); (c) and (d) for imposed single slip and identification on the CSSCs of WO crystals; and finally (e) and (f) for two orientation populations ($R_{crit}=0.95$).

3.2. Effect of single slip

Single slip is now assigned to all grains composing the aggregate by choosing a high q parameter value. As shown in FIG.II-8, assigning single slip to all grains leads to much stiffer macroscopic

response using the two self-consistent models. This can be explained by the plastic strain incompatibilities induced by the activation of one slip system per grain even at high plastic strain amplitudes. Therefore, the plastic strain accommodation between a given grain and its neighbours becomes more difficult which leads to high stress amplitudes.

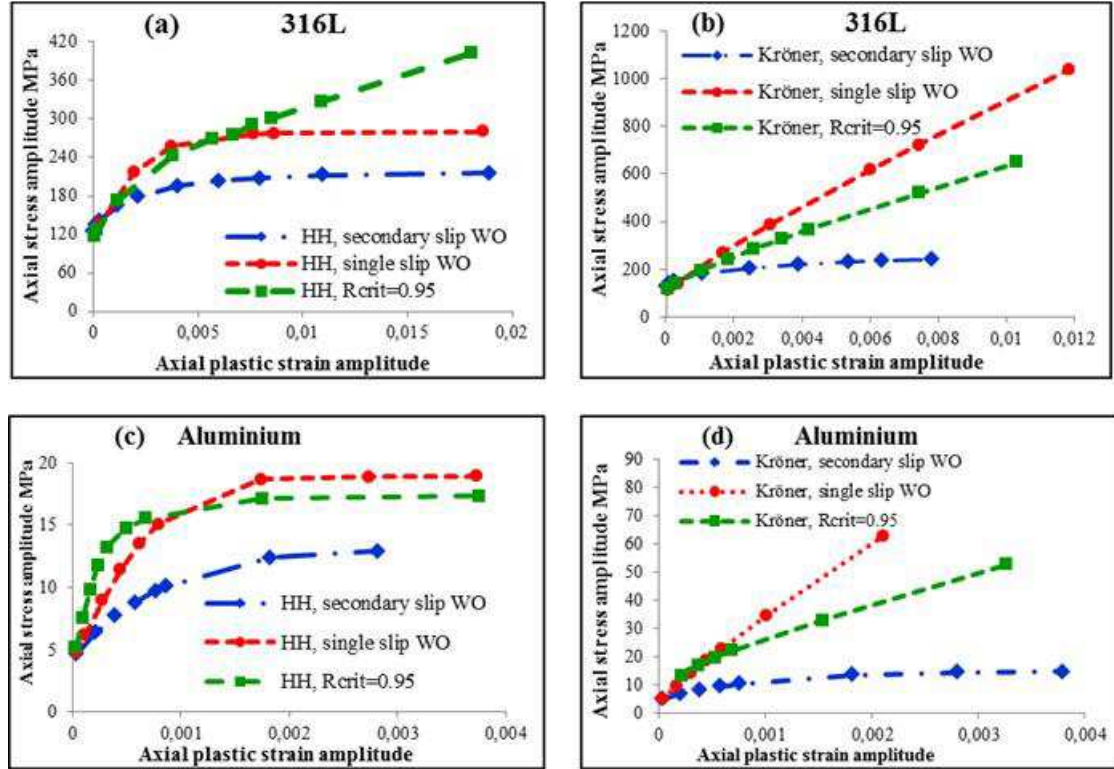


FIG. II-8: The effect of the crystalline law parameters on the predicted macroscopic response of the Hill-Hutchinson (HH) and the Kröner models for the 316L austenitic stainless steel (a and b) and aluminium polycrystal (c and d).

FIG.II-9 represents the predicted macroscopic CSSCs for 316L, Cu, Ni and Al, using the three models. Experimental data are represented for comparison too using literature results (316L (Gorlier, 1984), Al (Giese et al., 1990), Ni ([Morrison, 1994] and [Buque et al., 2001a]) and Cu (Polak et al., 1992)).

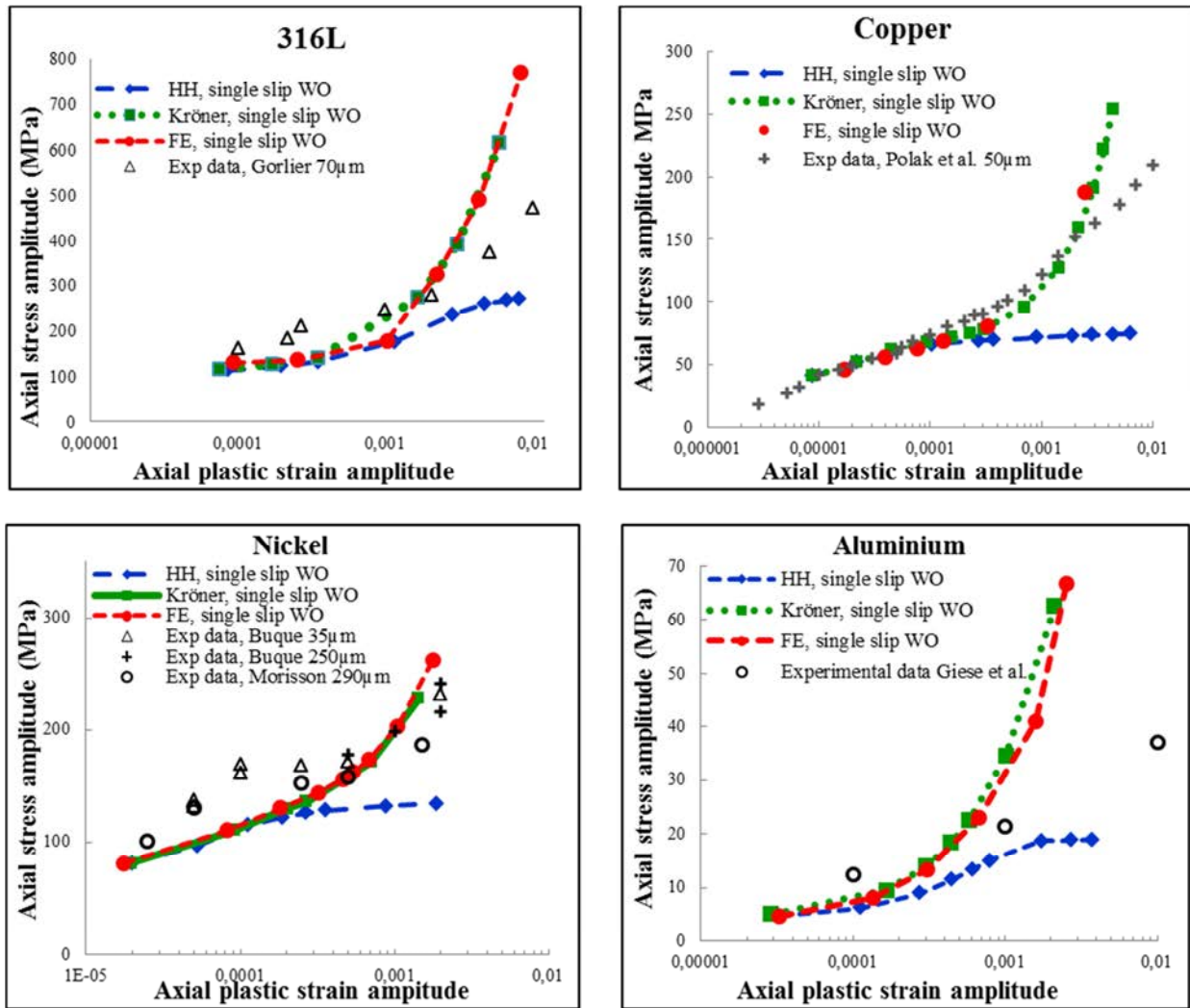


FIG. II-9: The predicted polycrystalline CSS curves, obtained by the Hill-Hutchinson (HH) and the Kröner models. Those obtained by Finite Elements calculations (FE) are represented for comparison [20, 40]. Single slip is imposed and the parameters identification is made by using the CSSCs of well-oriented crystals (WO). Experimental polycrystalline data: 316L (Gorlier, 1984), Ni ([Morrison, 1994] and [Buque et al., 2001a]), Al (Giese et al., 1990), Cu (Polak et al. 1992). The grain sizes are mentioned in the figures.

At low plastic strain amplitudes, the macroscopic curves predicted by the Hill-Hutchinson and the Kröner models are very similar or even identical to those obtained by FE calculations. This can be interpreted by the fact that at this range of plastic strains, only a small fraction of the grains composing the polycrystal is plastically deformed (grains with high Schmid factor). The hypothesis of elastic or elastic-plastic interaction between the inclusion and the matrix has a weak effect since the matrix can be considered as quasi-elastic. However, the Hill-Hutchinson model considerably underestimates the macroscopic cyclic behaviour for plastic strains higher than some 10^{-3} for 316L and some 10^{-4} for Cu, Ni and Al which are softer materials. The predicted curves tend toward a stabilized cyclic behaviour where the stress remains fairly constant, whatever the applied plastic strain. As for the Kröner model, its predictions agree very well with the FE computations ones, even at high plastic strain amplitudes, for the four studied polycrystals. The relative error is lower than 5% for a large range of plastic strain (some 10^{-6} - 10^{-2}) and for the different considered metals and alloys. As mentioned before, imposing activation of a unique slip system in each grain leads to severe incompatibilities between each grain and its neighbours. The probability that the plastic strain tensor

induced by the activated slip system of a considered grain has a large component on the slip systems of the neighbouring ones is very weak. The plastic strain accommodation is then difficult and each grain can be seen as embedded in a quasi-elastic matrix. This localization rule corresponds to the Kröner scheme which may explain qualitatively the fair agreement between the Kröner predictions and FE calculations ones in this case.

When compared to the experimental data, the three models slightly underestimate the macroscopic stresses for low plastic strain amplitudes, probably due to the effect of grain size occurring at low plastic strains for which deformation-induced microstructures are loose and not well defined (Steckmeyer et al., 2012). Such grain size effect is neglected in the present work to focus on the use of single crystal data.

For higher plastic strains, the Hill-Hutchinson model greatly underestimates the real cyclic behaviour, contrarily to the Kröner and the FE ones which overestimate the macroscopic stress levels. The difference between the stresses predicted by the two models and those measured experimentally varies from one metal/alloy to another and seems to depend on the stacking fault energy (SFE). Indeed, for plastic strain amplitude of $2 \cdot 10^{-3}$, the difference between the stress amplitude predicted by the Kröner model and the one provided by literature is equal to 11.5% for Ni and 7% only for 316L. For Al, the difference is more pronounced and reaches 38% for plastic strain amplitude of 10^{-3} . However, the macroscopic cyclic curves predicted for copper are very close to the measured ones for a large range of plastic strain amplitudes (lower than 3×10^{-3}). Among the four studied polycrystals, Al presents the highest SFE value which favours the activation of multiple slip systems. The activation of secondary slip system induces a softer macroscopic response than the one predicted by the Kröner model and FE method with imposed single slip. For the same plastic strain amplitudes, the difference between the predicted stresses and those obtained experimentally are lower for Ni, Cu and 316L which are less prone to multiple slip.

FIG.II-7 (c) and (d) represent the obtained hysteresis loops for 316L stainless steel, for two imposed total strain levels. At low imposed total strain, the hysteresis loops predicted by the three models are very similar. The shape and the stress peaks are very close. At high imposed strain, the Kröner model seems to predict hysteresis loops very close to those obtained by finite elements calculations. The shape and the size of the loops are similar for the two models. On the contrary, the Hill-Hutchinson model greatly under-estimates the stress peaks and the shape of the predicted hysteresis loops is very different from those obtained by FE method.

For the four polycrystals: 316L, Cu, Ni and Al, imposing single slip to all grains leads to a better prediction of the macroscopic behaviour when the Kröner model is used, especially for Ni at high plastic strain amplitudes and for copper at plastic strain amplitudes lower than 3×10^{-3} . However, these predictions are not accurate enough at large plastic strains. Indeed, the Kröner localization rule widely overestimates the macroscopic cyclic behaviour at high plastic strain amplitudes. The hypothesis of a pure single slip imposed to all grains does not seem realistic when exploring a wide domain of remote strain amplitudes. As mentioned previously, it is indeed well-known that at high plastic strains, more complex dislocation microstructures than single slip ones are observed in grains oriented for multiple slip ([Buque et al., 2001], [Li et al., 2009]...).

3.3. Effect of grains oriented for multiple slip

In this part, grains oriented for multiple slip are taken into account as well. The grains composing the aggregate are separated into two orientation families: crystals oriented for single slip, located in the central area of the standard triangle, and crystals oriented for multiple slip, located at the periphery. A value of 0.95 is taken for the critical ratio R_{crit} in order to be in agreement with TEM observations (FIG.II-3). The predicted CSS curves for 316L, Ni, Al and Cu are plotted in FIG.II-10. Experimental data, provided from the literature are represented for comparison: (Gorlier, 1984) for 316L, ([Giese et al., 1990] and [Videm and Ryum, 1996]) for Al and ([Morrison, 1994], [Buque et al., 2001a] and [Weidner et al., 2008]) for Ni and ([Polak et al., 1992], [Winter et al., 1980] and [Mughrabi and Wang, 1988]) for Cu.

The three models lead to very close predictions at low plastic strain amplitudes (lower than 10^{-3} for 316L, 2×10^{-4} for Ni, 4×10^{-4} for Cu and 3×10^{-3} for Al). At higher plastic strains, the Hill-Hutchinson model leads to a considerable underestimation of the macroscopic cyclic stress amplitudes for the four studied polycrystals. As for the Kröner model, the predicted curves are very close to those obtained by FE calculations for 316L, Cu and Ni with a difference lower than 11.5%, for a large range of the plastic strain amplitude (up to 6×10^{-3} for 316L, 0.01 for Cu and 3.6×10^{-3} for Ni). This agreement holds for Aluminium too, at least for plastic strain lower than 10^{-3} . Beyond this value, the macroscopic stresses predicted by the Kröner model are higher than those obtained by FE calculations, with a maximum error of 36%.

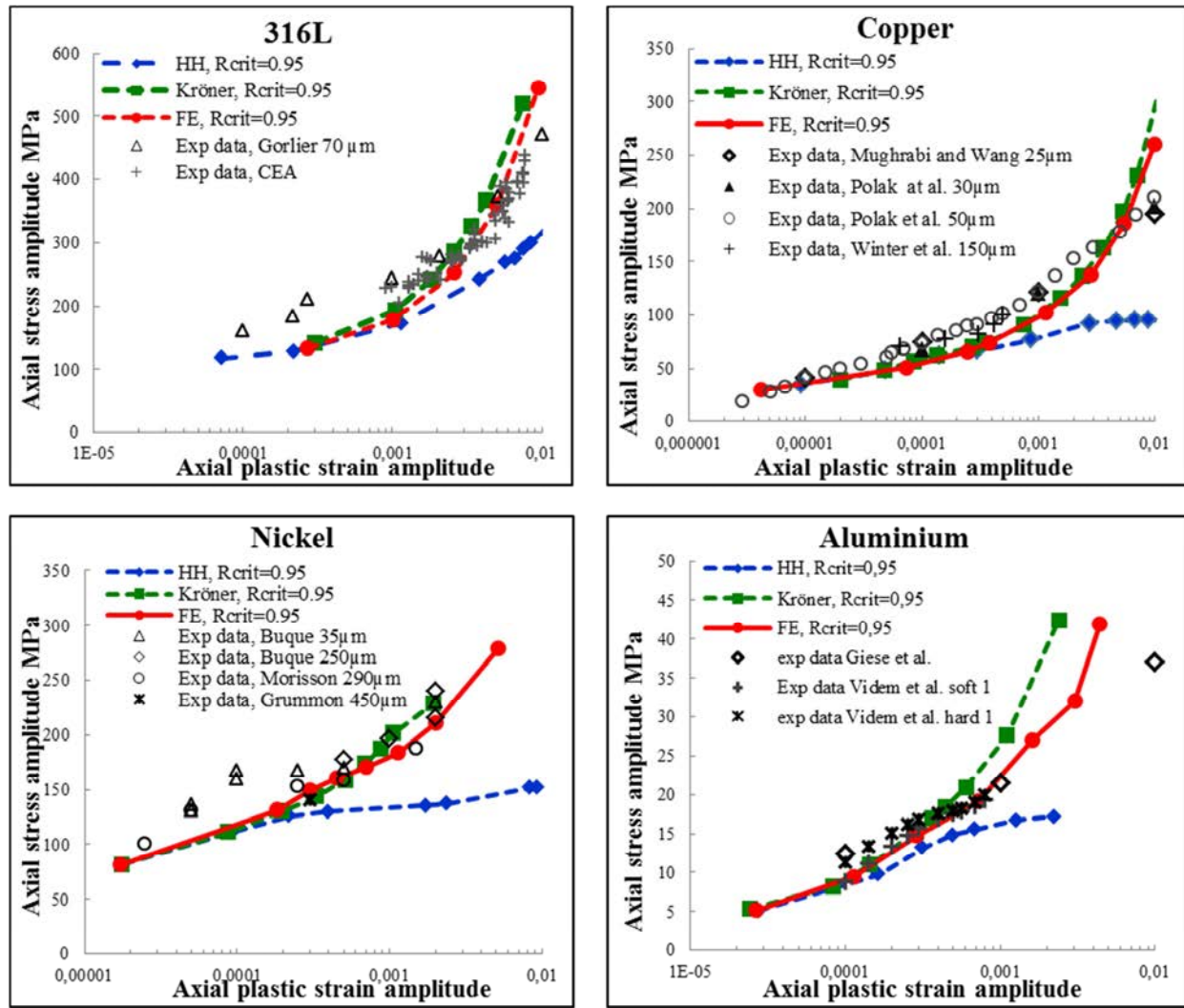


FIG. II-10: The predicted polycrystalline CSS curves, by both the Hill-Hutchinson (HH) and the Kröner models. Those obtained by Finite Elements calculations (FE) are represented for comparison ([Sauzay et al., 2010] and [Steckmeyer et al., 2010]). Two populations of orientations are considered: single slip is imposed to those located in the central area ($q=105$) and multiple slip is allowed in grains located at the periphery of the standard triangle. The critical value $R_{crit}=0.95$. Experimental polycrystalline data: 316L (Gorlier, 1984), Ni ([Morrison, 1994], [Buque et al., 2001a] and [Weidner et al., 2008]), Al ([Giese et al., 1990] and [Videm and Ryum, 1996]) and Cu ([Polak et al., 1992], [Winter et al., 1980] and [Mughrabi and Wang, 1988]).

For both the Kröner homogenization and the FE calculations, the physically-based partition into two orientation families allows a softer macroscopic response in comparison with the single slip model (FIG.II-8). For low plastic strain amplitudes, the difference between the two approaches (single slip and $R_{crit}=0.95$) is very weak, because the grains oriented for multiple slip are not activated yet. For higher plastic strain, multiple slip occurs in those grains which allows a better accommodation of the plastic strain and then a softer response. For the Hill-Hutchinson model, the introduction of grains oriented for multiple slip leads, on the contrary, to a stronger macroscopic response at high plastic strain. This can be explained by the fact that in the Hill-Hutchinson approach, the introduction of grains oriented for multiple slip has a minor effect on the plastic strain accommodation since this latter is ensured by the elastic-plastic interaction law between each grain and the matrix. However, the stronger cyclic hardening of these crystals (see FIG.II-4) leads to an additional macroscopic hardening even higher than the one predicted by this model in the case of imposed single slip.

Compared to the experimental data, the Hill-Hutchinson provides once more a very soft response and the consideration of grains oriented for multiple slip seems to have a weak effect on the predicted CSS curves. Concerning the Kröner and FE models, the predicted stress levels are lower than those measured experimentally for low plastic strain amplitudes. The difference is more pronounced for 316L (30%) and Ni (28%) and almost negligible for Cu and Al. This could be explained by the role of the grain size, which is neglected in our models. In fact, at the beginning of the cyclic deformation, the microstructure composed of walls and labyrinths is not well formed yet and the grain size effect cannot be neglected at this stage. This reasoning is in agreement with the results of Haddou et al. (2004) and El-Madhoun et al. (2003) who pointed out a non-negligible grain size effect on the cyclic stress-strain curves for polycrystalline nickel and aluminium respectively. For polycrystalline nickel, this grain size effect is observed essentially for low plastic strain amplitudes. As plastic strain increases, the PSB and the labyrinth structures become more predominant and the grain size effect less marked, which may explain the better agreement between the two models predictions and the available experimental data.

FIG.II-7 (e) and (f) represent the predicted hysteresis loops obtained for 316L, using the three models. At low total strain amplitudes, the three loops have the same shape and the stress peaks are very close. When the total strain increases, the loops predicted by the Hill-Hutchinson model do not fit with those obtained by FE calculations anymore. Contrarily to the Kröner model which allows a very accurate prediction of the hysteresis loops with respect to FE results.

Experimental and predicted hysteresis loops, for polycrystalline nickel and 316L austenitic stainless steel, are plotted in FIG.II-11 and FIG.II-12 respectively. Details concerning the experimental results can be found in Steckmeyer et al. (2012) for Ni and in Guilhem (2011) and Lemaitre and Chaboche for 316L.

Concerning Ni polycrystal, for plastic strain amplitude of 2.5×10^{-4} and large grain size ($290 \mu\text{m}$), the agreement between the predicted and the measured hysteresis loops is rather correct and the shape of the experimental loop is accurately reproduced by the three models. At a bit higher plastic strain amplitude (5×10^{-4}) with a lower grain size ($80 \mu\text{m}$), the measured loop is reasonably predicted during tension and compression, especially using the Kröner and FE approaches. Nevertheless, an underestimation of the axial stress peaks is noticed. The underestimation of the axial stress amplitude is about 17% for the Kröner and FE models and 25% for the Hill-Hutchinson one.

As for the 316L austenitic stainless steel (FIG.II-12), the hysteresis loops predicted by the two self-consistent are very close in shape and stress peaks to the experimental one for low total strain amplitude (2×10^{-3}). At higher strain (5×10^{-3}), the axial stress peaks predicted by the Kröner model are very close to those measured experimentally (Lemaitre and Chaboche). Nevertheless, the experimental loop is not well reproduced during tension and compression and the predicted kinematic hardening remains much higher than the measured one. As for the Hill-Hutchinson model, it seems to largely underestimate the axial stress peaks and the measured loop shape is not correctly described.

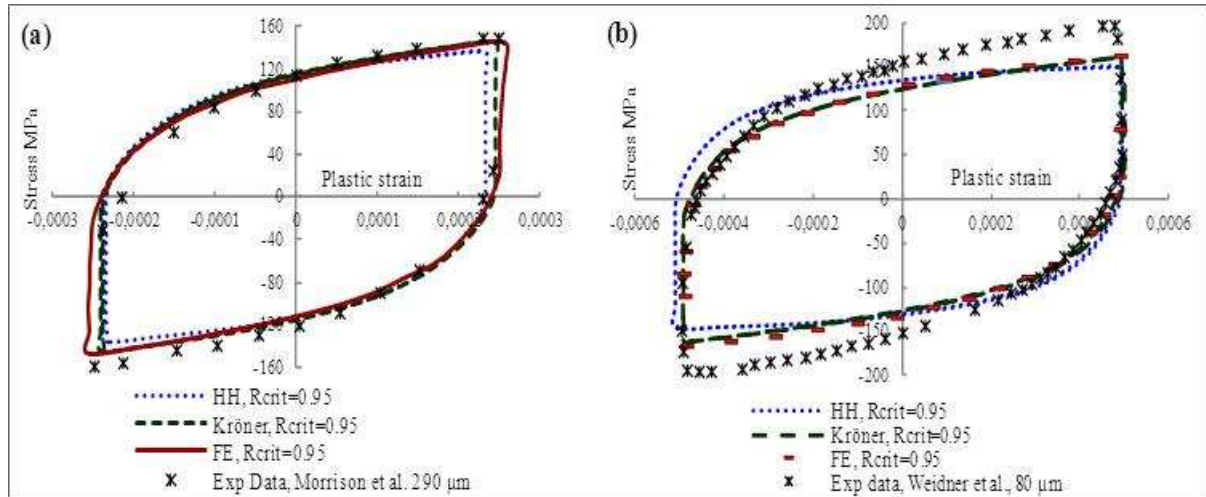


FIG. II-11: Comparison between experimental and predicted hysteresis loops for polycrystalline nickel at two plastic strain amplitudes: (a) 2.5×10^{-4} and (b) 5×10^{-4} . Two orientation populations with $R_{crit}=0.95$. Experimental data: (Morrison et al., 2001) and (Steckmeyer et al., 2012) respectively.

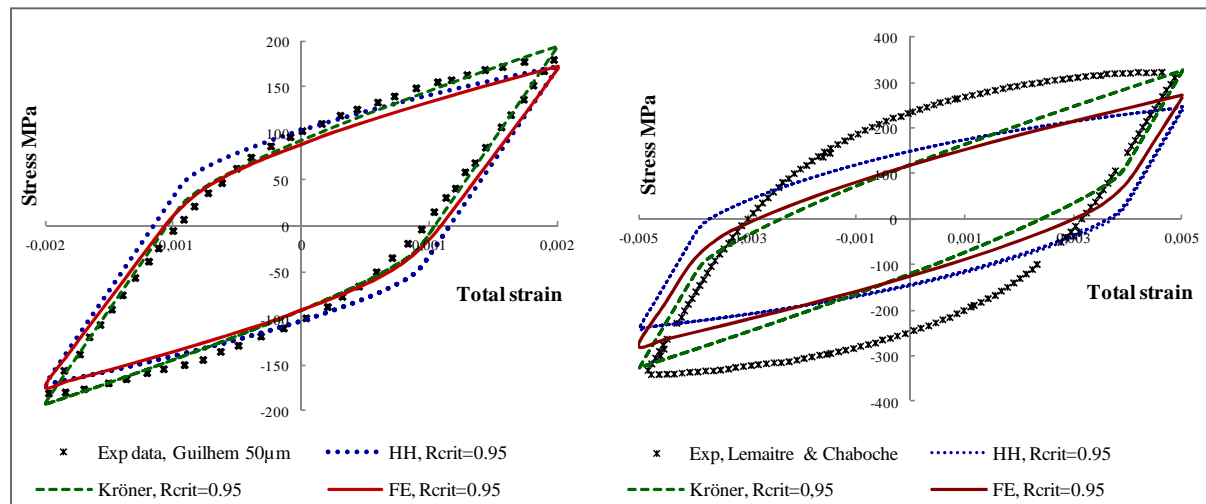


FIG. II-12: Comparison between experimental and predicted hysteresis loops for polycrystalline 316L stainless steel using both the Hill-Hutchinson and Kröner models, with two orientation populations ($R_{crit}=0.95$), for two total strain amplitudes: (a) 2×10^{-3} and (b) 5×10^{-3} . Experimental data: (a) Guilhem, 2011, (b) Lemaître and Chaboche.

4. Polycrystalline mean grain distributions

4.1. Mean grain plastic strain distribution

Once the accuracy of the two self-consistent models has been discussed at the macroscopic scale, the predicted mean grain plastic strain distributions are calculated by each model and for each crystalline plasticity law, using 80 grains. Calculations based on aggregates composed of 80, 100 and 200 grains lead to similar mean grain equivalent plastic strain and stress distributions. For each applied strain, the mean grain von Mises equivalent plastic strain is computed for each grain and normalized by the distribution average value.

4.1.1. Comparison with FE calculations

Distributions calculated for the 316L steel, using the Kröner, the Hill-Hutchinson and FE models, with two orientation populations ($R_{crit}=0.95$) are plotted in FIG.II-13. Similar distribution dependence with respect to the remote plastic strain is observed either for allowed secondary slip or pure single slip crystalline laws.

One can notice that, for the three homogenization models, the calculated distributions are largely scattered at low plastic strain amplitudes. The minimum mean grain value is almost equal to zero, while the maximum one is for instance 2.5 times higher than the average value in the case of the FE calculations. The scatter amplitude varies from one model to another and is higher when the FE method is used. These heterogeneous distributions can be explained by the fact that, at low plastic strain amplitude, many badly-oriented grains are almost still elastically deformed while other ones are strongly plastically deformed due to their high Schmid factor values. The higher the applied plastic strain, the more tightened the distribution. For plastic strain amplitudes higher than some 10^{-3} , the distributions seem to tend toward a stabilized one and the distributions predicted by FE calculations seems to stabilize more quickly than those predicted by the two self-consistent models.

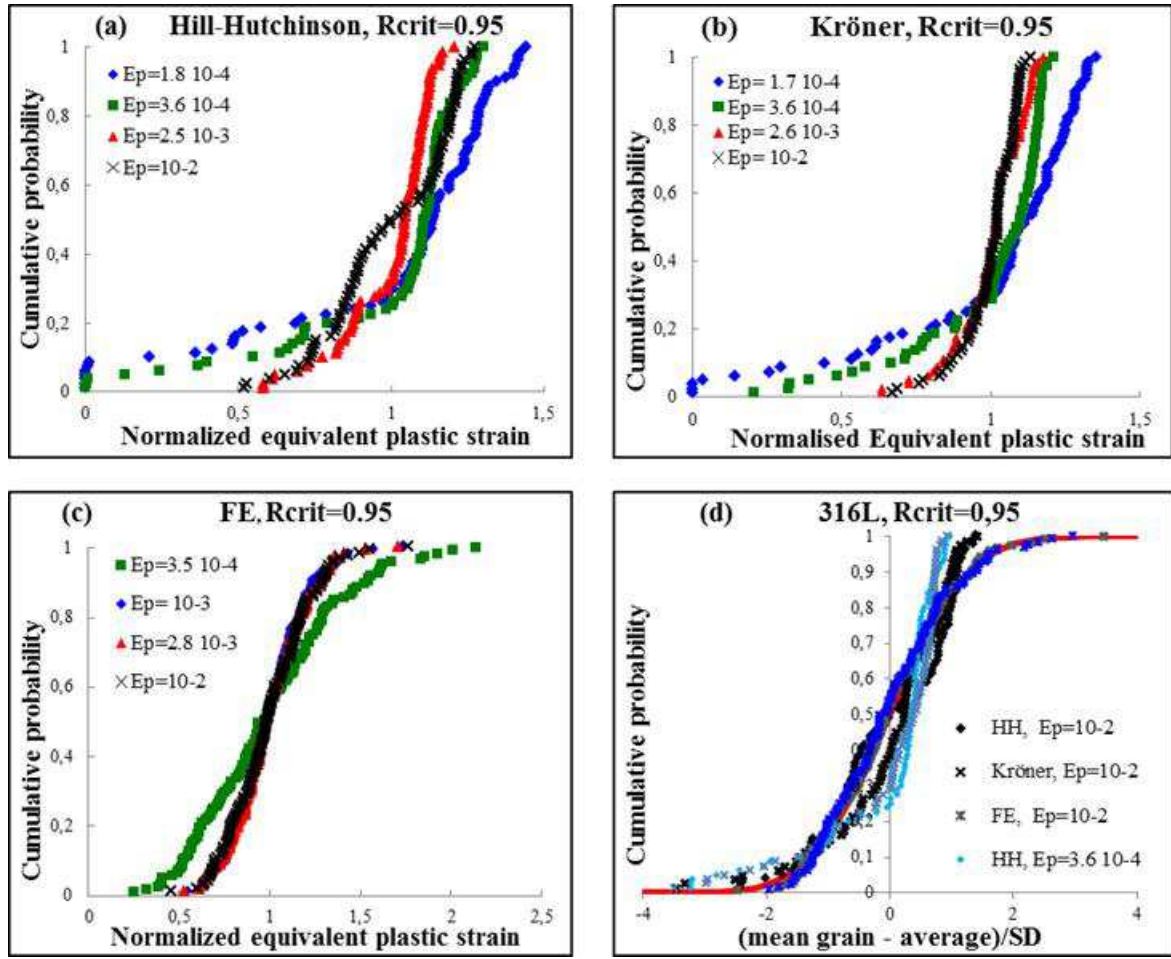


FIG. II-13: Cumulative probability functions of the normalized mean grain Von Mises equivalent plastic strain for different macroscopic plastic strain amplitudes obtained using the three models for 316L with $R_{crit}=0.95$. (a) Hill-Hutchinson, (b) Kröner and (c) FE method. Each mean grain equivalent plastic strain is divided by the average value. (d): comparison between the cumulative probability functions computed by the three models and the standard Gaussian distribution after renormalization by subtracting the average value and then dividing by the square deviation (SD).

Furthermore, at low plastic strain amplitude, distributions predicted by the self-consistent models are more extended to the left side than the FE ones. For instance, for $\frac{\Delta E^p}{2} = 3.5 \times 10^{-4}$, 4% of grains are almost still elastically deformed following the Hill-Hutchinson model while all the grains are plastically deformed following the Kröner and FE models. The lowest value is 0.2 times the average one for the Kröner model and 0.25 for the FE one. The difference between the incremental and the Kröner models lies in the localization rule. In fact, in the Kröner scheme, the term multiplying the difference of the plastic strains between the polycrystal and one given phase is almost equal to the elastic shear modulus μ ($2\mu(1 - \beta) \approx \mu$), which corresponds to an elastic interaction between the grains and the matrix. Therefore, for the same applied strain amplitude, the internal stresses predicted by the Kröner model are larger than those predicted by the incremental one. Thus the number of grains plastically deformed is higher when using the Kröner scheme. Applying the same reasoning to well-oriented grains, the difference of the plastic strains between the various grains is lower in the Kröner model which leads to more homogeneous (tightened) distributions with respect to the ones obtained by the incremental model.

Another point of discrepancy between self-consistent and full-field approaches is the presence or not of a tail at low plastic strain amplitudes. The presence of such a tail, extended toward high equivalent plastic strains, corresponds to the presence of (well-oriented) grains characterized by their high plastic activity compared to the other ones. This tail has already been highlighted by simulations ([Bennett and McDowell, 2003]) and [Steckmeyer et al., 2012]). Contrarily to the distribution curves obtained by Finite Element calculations, those calculated by the Kröner and the Hill-Hutchinson models do not exhibit any tail on the right side even at low plastic strain amplitudes. This is in agreement with the FE computations results obtained by Sauzay (2007) using two different configurations: the grain + matrix configuration (inter-orientations scatter) and the grain + neighbouring grains + matrix one (intra-orientation scatter), to study the effect of the crystalline elasticity anisotropy. The deduced cumulative probability curve of the effective Schmid factors corresponding to the inter-orientation scatter does not exhibit any high value tail contrarily to the intra-orientation configuration for which a marked tail is pointed out. This may be explained by the fact that in the self-consistent scheme, the plastic strain field is assumed homogeneous in each crystallographic phase and the intra-orientation strain scatter due to the neighbour grain effect is neglected.

The evolution with the macroscopic plastic strain amplitude of the standard deviation and the amplitude of the normalized equivalent plastic strain distributions, for 316L with $R_{crit}=0.95$, are plotted in FIG.II-14. At low macroscopic plastic strain amplitude, the calculated distribution normalized amplitude and standard deviation (SD) are considerably high for the three models. As the macroscopic plastic strain increases, the normalized amplitude and SD decrease considerably till reaching a quasi-plateau where the distribution parameters change only slightly with the macroscopic plastic strain amplitude increasing. The two scatter parameters computed by the FE calculations are higher than those predicted by the two self-consistent models. At $\frac{\Delta E^p}{2} = 3.5 \times 10^{-4}$ (respectively $\frac{\Delta E^p}{2} = 0.001$), the normalized amplitude obtained by FE calculations is 1.45 (1.75) times higher than the one calculated by the Hill-Hutchinson model and 1.89 (2.8) times higher than the one calculated by the Kröner model.

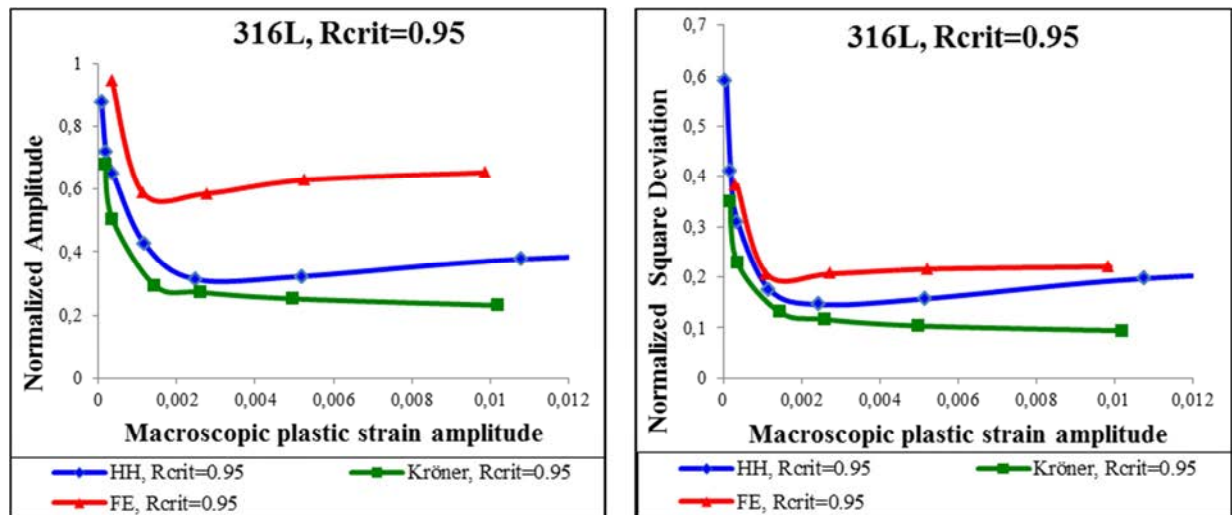


FIG. II-14: Evolutions with the macroscopic plastic strain of the normalized amplitude and standard deviation of the equivalent mean grain plastic strain distributions obtained by the three homogenization models, for the 316L austenitic stainless steel with two populations of crystals and $R_{crit}=0.95$.

This result highlights one of the fundamental differences between mean-field and full-field homogenization models. Even if the studied mean-field approaches lead to predictions of the macroscopic cyclic behaviour close to the ones obtained by the FE computations, they only predict the scatter induced by the grain orientation and neglect the intra-orientation scatter induced by the random orientations of the neighbouring grains. Indeed, the FE computations ([Sauzay and Jourdan, 2006], [Sauzay, 2007]) based on cubic elasticity and grain-neighbour grains-matrix meshes show that the scatter induced by the random orientations of the neighbouring grains is as large as the one induced by the grain orientation itself. This is true whether considering crystalline elasticity only (Sauzay, 2007) or crystalline plasticity and isotropic elasticity (Barbe et al., 2001b). If we consider the inter-orientation scatter predicted by the Kröner model and the overall scatter predicted by the FE method, the intra-orientation scatter amplitude (standard deviation SD) is almost two (1.4 respectively) times higher than the inter-orientation scatter ones. This is in agreement with the results obtained by Barbe et al. (2001b) for monotonic loading using the inter-orientation scatter computed using the Berveiller-Zaoui model and the overall scatter computed using the FE method.

Once the distributions of mean grain plastic strain are computed, it is of interest to compare them to some usual statistical distributions. The first intuition was to check if the distributions computed by the two self-consistent models as well as the FE method can be fairly described by the well-known Gaussian statistical distribution. This latter seem to reasonably describe the mean grain stress or strain distributions for linear cubic elasticity (Sauzay and Jourdan, 2006) and the full-field stress/strain distributions for linear viscoplasticity (Idiart et al., 2006). For each remote plastic strain, the mean grain von Mises plastic strain is normalized by first subtracting the average value of the distribution and then dividing by the standard deviation. The average value and the standard deviation of the resulting statistical distribution are equal to zero and 1 respectively. The obtained standard distributions as well as the standard Gaussian ones are plotted in FIG.II-13 (d). It can be shown that the standard distributions computed by both the Hill-Hutchinson and the Kröner models are not fairly modelled by the Gaussian standard distribution. In fact, the computed standard distributions are asymmetric and no tail is observed. On the contrary, the Gaussian distribution curve

seems to be in quite fair agreement with the results obtained by FE computations. The same agreement has been showed by Steckmeyer et al. (2012), using FE calculations on Ni polycrystals.

4.1.2. Effect of the crystalline laws

Another point of interest is to study the effect of the crystalline plasticity laws parameters on the evolution of the equivalent mean grain plastic strain distributions. In FIG.II-15 are plotted the distribution normalized amplitudes computed for 316L using the three homogenization models and the three crystalline plasticity laws adopted previously (allowed secondary slip, imposed single slip and two populations of orientations using $R_{crit}=0.95$). The general evolution of the distribution amplitude is rather similar for the three cases. At low plastic strain amplitude, the distributions are largely scattered and the three crystalline plasticity laws lead to very close scatter amplitudes. This may be explained by the fact that during the micro-plasticity regime, only grains with high Schmid factor values are plastically deformed and almost only single slip occurs. Therefore, allowing or hindering secondary slip does not affect much the predicted mean grain plastic strain distribution. For the two self-consistent models, imposing single slip or taking into account two orientation populations ($R_{crit}=0.95$) do not affect the evolution of the distribution parameters with increasing strain amplitude as well. This is not the case when secondary slip is allowed. For the Kröner model (respectively FE calculations), allowing secondary slip leads to a scatter amplitude 5.45 (2.5) times lower than the one obtained with imposing single slip, for $\frac{\Delta E^p}{2} = 0.0088$. On the contrary, for the Hill-Hutchinson model, the scatter is higher when secondary slip is allowed and seems to tend towards the same quasi-plateau reached at high plastic strain amplitude for either imposed single slip or $R_{crit}=0.95$. As it has been pointed out previously, the Hill-Hutchinson localization rule seems to be quasi-insensitive to the chosen crystalline plasticity law, either at the macroscopic scale or at the crystallographic phase scale. This may be due to the nature of the elastic-plastic interaction law, which allows a rather easy accommodation of the plastic incompatibilities between each grain and the surrounding matrix. Introducing an additional hardening, by imposing pure single slip for instance, or hindering it by allowing multiple slip, seems to be overcome by the “soft” interaction between the grains and the matrix.

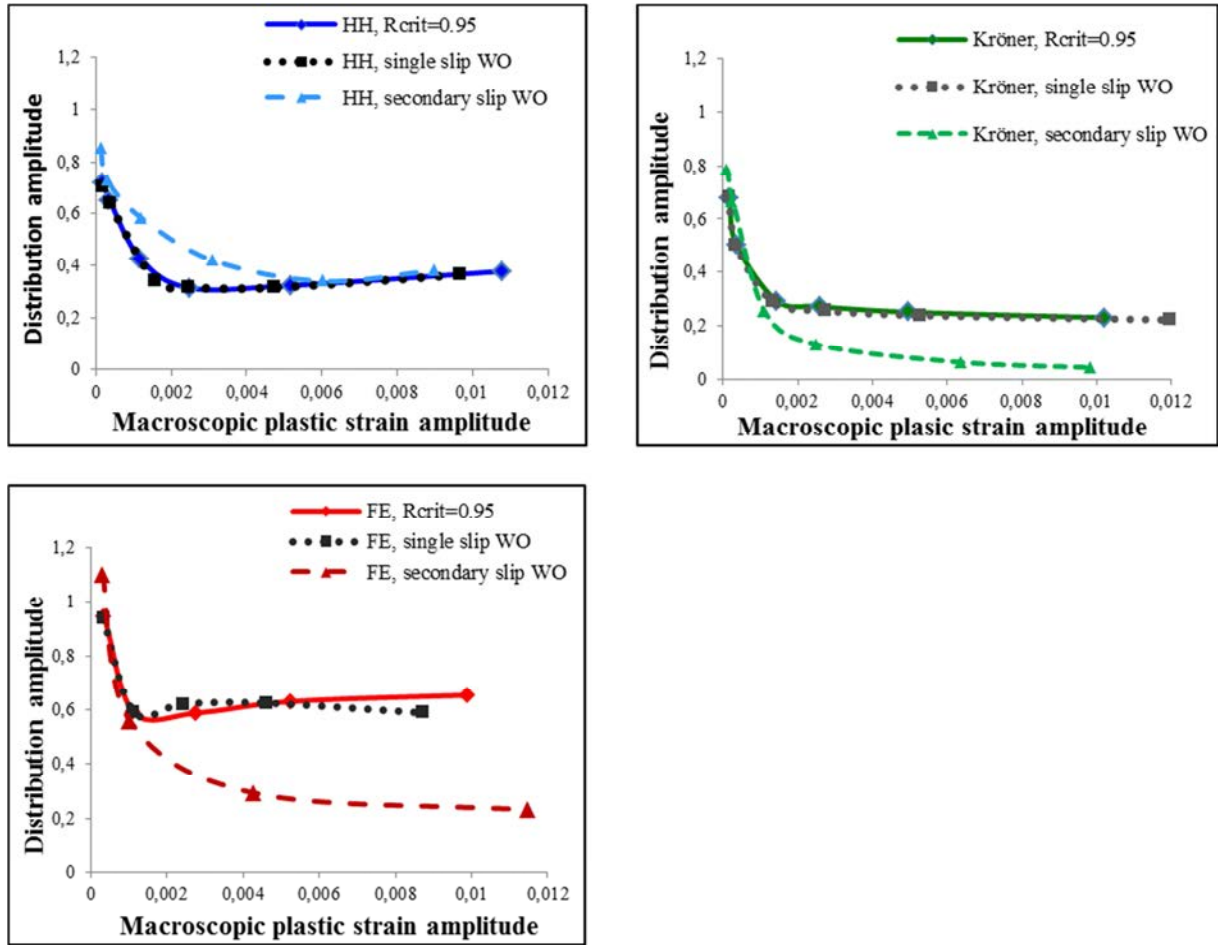


FIG. II-15: Influence of the crystalline plasticity laws on the evolution with macroscopic plastic strain of the amplitude of the equivalent mean grain plastic strain distributions, calculated by the three models, for the 316L austenitic stainless steel.

It should be noticed that for the Kröner model, the evolution of the normalized standard deviation (SD) with plastic strain amplitude can be described by a material independent master curve when convenient normalization is used. The macroscopic plastic strain amplitude is divided by $2\tau_0/Y$ with τ_0 is the critical shear stress value and Y is the Young modulus (Hutchinson, 1970). The evolution with the normalized macroscopic plastic strain amplitude of the normalized SD, predicted by the Kröner model using the three different crystalline plasticity laws, are plotted in FIG.II-16. The master curve follows a power law for which the proportionality constant and the exponent vary from one crystalline plasticity law to another but is material independent. The constant and the exponent are given in FIG.II-16 a-c. For the Hill-Hutchinson model, normalizing using the critical shear stress and the Young modulus did not allow us to get such material-independent master curve.

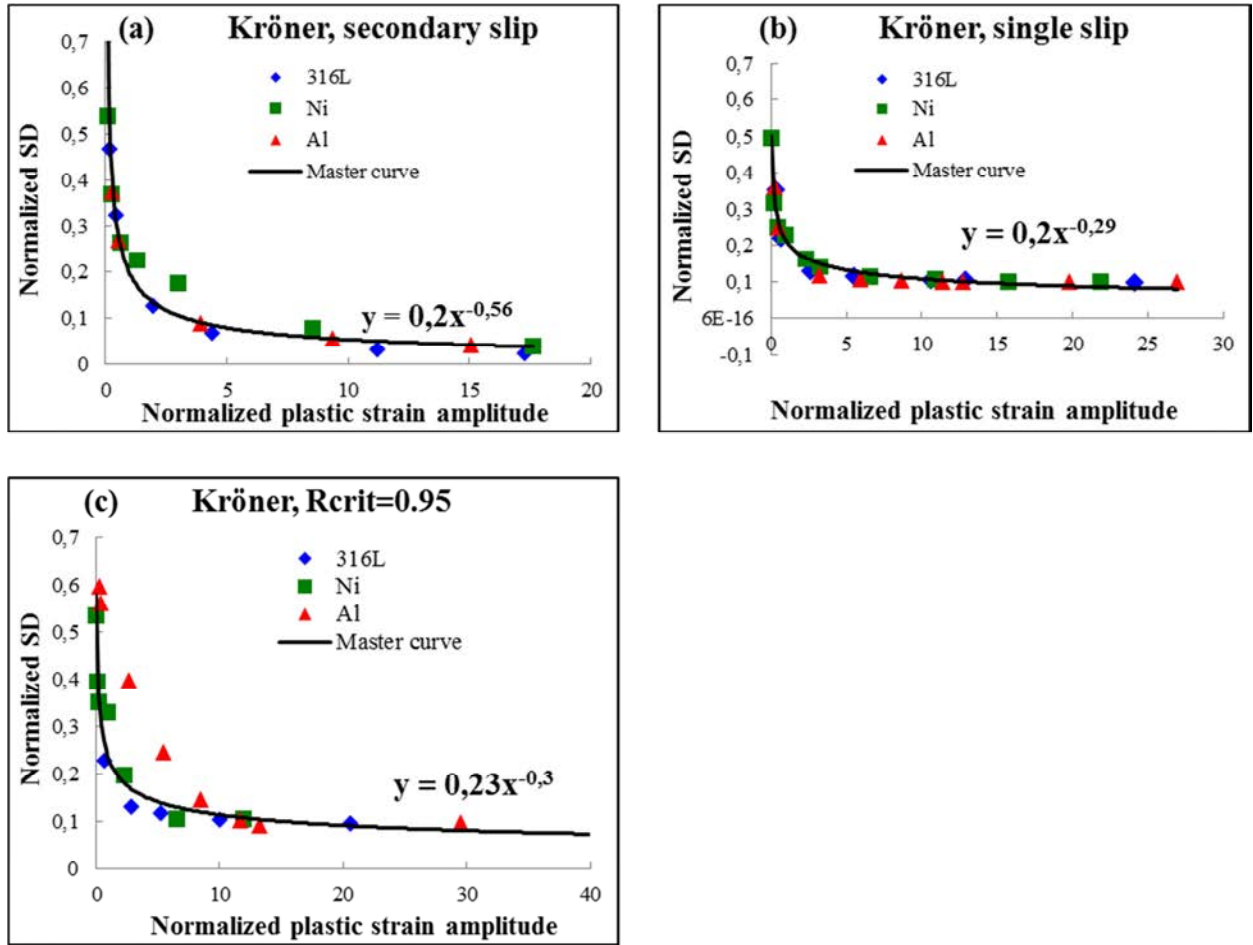


FIG. II-16: (a), (b) and (c): The evolution of the square deviation (SD) of the distributions of normalized equivalent plastic strain with the normalized macroscopic plastic strain amplitude, predicted by the Kröner model for polycrystalline 316L, Ni and Al and for the three crystalline plasticity laws. The macroscopic plastic strain amplitude is divided by $2\tau_0/Y$ where τ_0 is the critical shear stress value and Y is the Young modulus (Hutchinson, 1970).

4.1.3. Comparison with experimental data

The mean grain plastic strain distributions predicted by the two self-consistent models as well as the FE computations are in fair agreement with many TEM observations available in the literature. Indeed, the observations of Buque et al. (2001a) and Li et al. (2009) show that at low plastic strain amplitude, the dislocation microstructures are very heterogeneous and strongly dependent on grain orientation (see FIG.II-3). Slips bands are usually observed in grains located at the centre of the standard triangle and sometimes in orientations close to $\langle 110 \rangle$ while orientations close to $\langle 001 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ exhibit labyrinth and wall microstructures, respectively. On the contrary, at higher plastic strain amplitudes, TEM observations carried out on austenitic stainless steel ([Gerland et al., 1997] and [Obtlik et al., 1994]) show that dislocation microstructures become more homogeneous and are composed predominantly of cells. This agrees with the large inter-orientation scatter predicted by the two self-consistent models at low plastic strain amplitudes and the tightening of the computed mean grain plastic strain distributions with increasing macroscopic plastic strain amplitude. FE homogenization leads to similar evolution.

However, mean-field homogenization models do not take into account the intra-orientation scatter induced by the neighbouring grains. This non negligible scatter has been already highlighted by numerous experimental observations related in the literature. Indeed, many observations concerning austenitic stainless steel ([Obtlik et al., 1994], [Man et al., 2002] and [Sauzay and Man, 2008]) copper ([Mughrabi and Wang, 1988] and [Winter et al., 1981]) and nickel (Blochwitz et al., 1996) polycrystals subjected to cyclic loading with remote plastic strain amplitude lower than 10^{-3} , pointed out a large heterogeneity in the dislocation microstructures and surface slip features in grains having similar crystallographic orientations but surrounded by grains of random orientations and shapes. This may be explained by the discrepancy between the plastic strain distributions predicted by the two self-consistent models and those calculated by the FE method as well as the absence of a high-value tail in the case of mean-field homogenization.

4.2. Mean grain stress distributions

In this section, we shall focus on the study of the mean grain axial stress distributions. As we did in the last part, the mean axial stress computed for each grain is normalized by the average one.

4.2.1. Comparison with the FE calculations

The obtained distributions, for 316L with $R_{crit}=0.95$, using the Hill-Hutchinson and the Kröner models are plotted in FIG.II-17, those obtained by FE calculations are presented too for comparison.

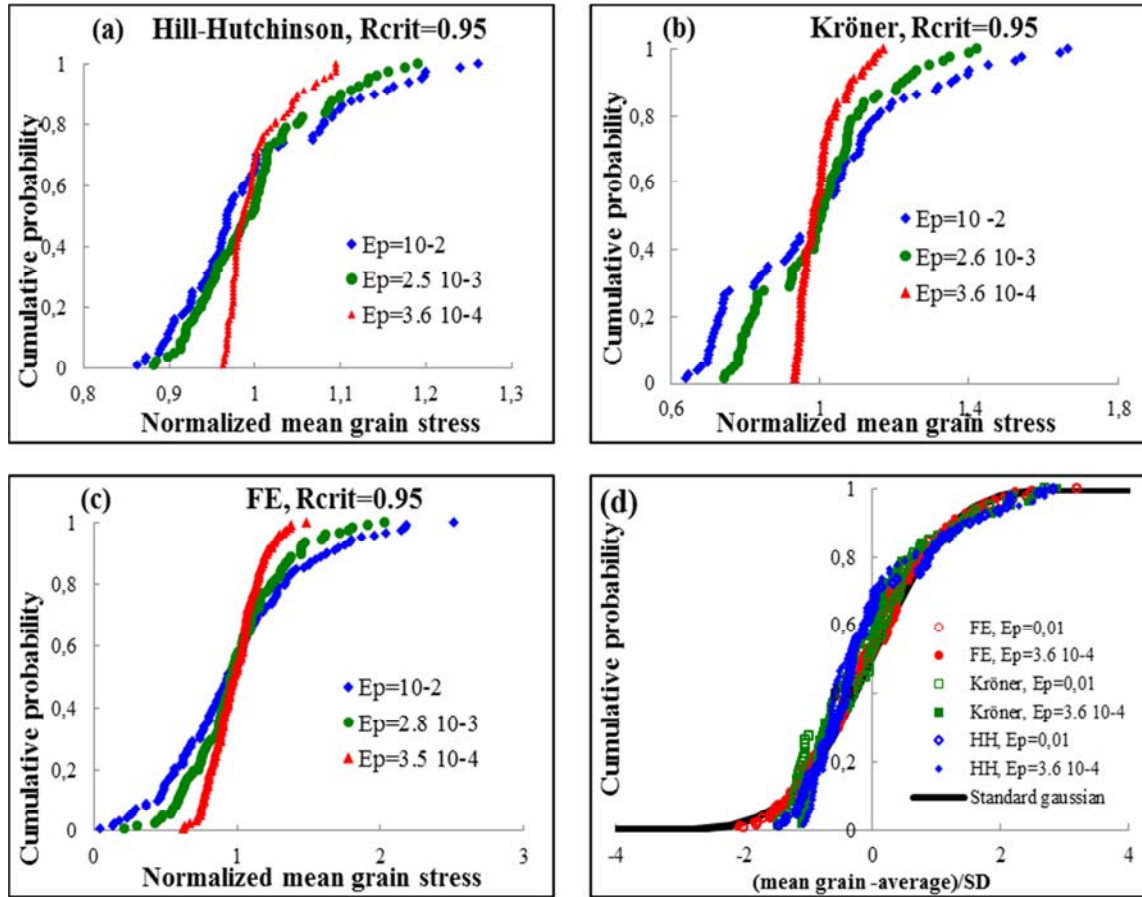


FIG. II-17: Cumulative probability functions of the mean grain axial stress predicted by the three models for the 316L austenitic stainless steel with $R_{crit} = 0.95$ and for different macroscopic plastic strain amplitudes. (a), (b) and (c): each mean grain axial stress is divided by the average value. (d): comparison between the cumulative probability functions computed by the three models and the standard Gaussian distribution (after renormalization by subtracting the average value and then dividing by the standard deviation (SD)).

One should notice that contrarily to the distribution of the mean grain plastic strain, the distribution of the mean grain axial stress is less scattered at low plastic strain regime. The scatter increases strongly with increasing plastic strain amplitudes. Independently of the macroscopic plastic strain amplitude and the constitutive crystalline law (FIG.II-18), the scatter predicted by the two self-consistent model remains very low compared to the scatter computed by FE calculations. For instance, for $R_{crit} = 0.95$, the normalized distribution amplitude predicted by the FE method is 4.5 times higher than the one computed by the Kröner model and 6 times higher than the one obtained by the incremental model. The scatter predicted by the Kröner model is slightly higher than the one obtained by the Hill-Hutchinson model for the three crystalline plasticity laws with a more pronounced discrepancy when pure single slip is imposed. Indeed, imposing single slip in all the grains composing the aggregate induces strong strain incompatibilities which are better accommodated using the incremental localization rule (elastic-plastic interaction) than using the Kröner one (elastic matrix). For the two self-consistent models, the scatter becomes stable for plastic strain amplitudes higher than some 10^{-3} whereas the scatter predicted by the FE calculations keeps increasing with the plastic strain increasing.

FIG.II-19 illustrates the inter-orientation heterogeneity predicted by both the Hill-Hutchison and the Kröner models, for polycrystalline 316L austenitic stainless steel with two orientation families ($R_{crit}=0.95$) and low plastic strain amplitude ($\sim 1.7 \cdot 10^{-4}$). As expected, for the two models, grains with the lowest plastic strain amplitudes are those subjected to the highest axial stress amplitudes which correspond to badly-oriented grains. The dependency of the mean grain axial stress amplitude with the equivalent plastic strain is rather-linear with the distinction of two well-marked lines, especially at high applied plastic strain amplitudes. The obtained almost-linear dependency is in agreement with the inter-orientation heterogeneity predicted by Barbe et al. (2001b) using the Berveiller-Zaoui self-consistent model, for monotonic loading. For higher plastic strain amplitudes, two distinct lines appear, likely due to the presence of two orientation populations; about 60% of the grains composing the aggregate are located along the upper line. This ratio is the same as the one of grains located in the central area of the standard triangle (grains oriented for single slip) for a critical ratio of 0.95. As only one slip system is activated per grain for the central orientation population, the elastic strain required to accommodate the imposed macroscopic plastic strain in those (well oriented) grains are higher than those computed for grains oriented for multiple slip. Indeed, the study of the slip activity predicted by the Kröner model for instance shows that only one slip system is activated in grains for which single slip is imposed while at least 6 slip systems are activated in those oriented for multiple slip, especially for high plastic strain amplitudes.

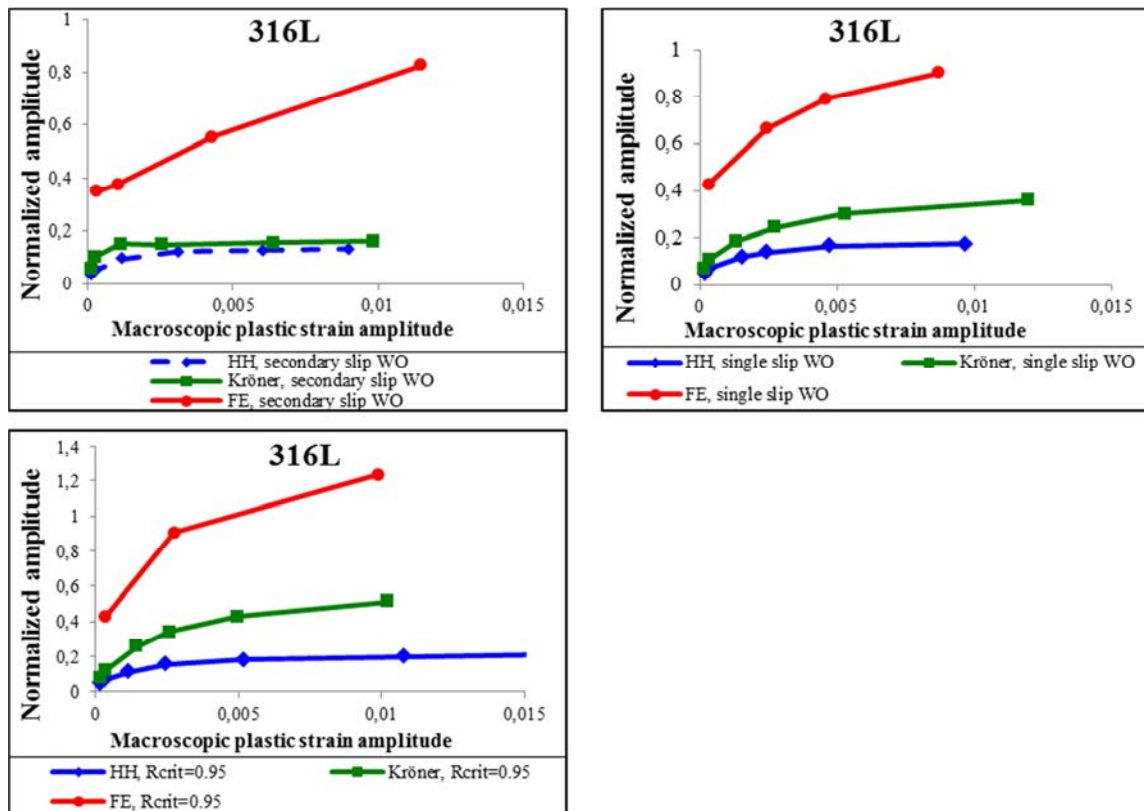


FIG. II-18: Comparison of the evolution of the mean grain stress distribution normalized amplitude with the macroscopic plastic strain amplitude, predicted by the three models for each constitutive crystalline law. 316L austenitic stainless steel.

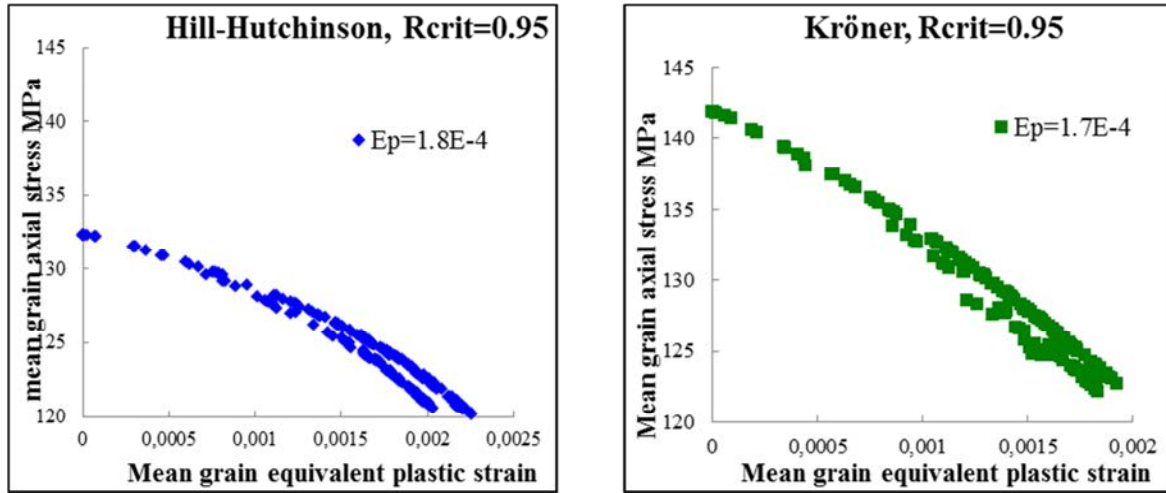


FIG. II-19: Inter-orientation heterogeneity of the cyclic mean grain response predicted by the two self-consistent models, for polycrystalline 316L austenitic stainless steel and for two plastic strain amplitudes. Two orientation populations were considered with $R_{crit}=0.95$.

As discussed in section 4.1, the observed disagreement between the FE computations and self-consistent approaches is probably due to the neighbour grain effects. Mean field models predict the scatter induced by the orientation only and crystalline elasticity FE computations held by Sauzay (2007) showed that the intra-orientation scatter of the mean grain stress, induced by the neighbouring grains, is even higher than the one induced by the grain orientation itself. If we consider the inter-orientation scatter predicted by the Kröner model and the overall one predicted by the FE method, the intra-orientation scatter amplitude (standard deviation) is 1.4 (respectively 1.6) times higher than the inter-orientation scatter ones.

Using finite elements computations on elastic-plastic polycrystals, Barbe et al. (2001b) plotted the mean response of each of the 200 grains of the polycrystal predicted by both the Berveiller-Zaoui homogenization (inter-orientation heterogeneity) and the FE (overall scatter) models. The intra-granular heterogeneity seems to be more pronounced or at least comparable to the inter-orientation one. Similar conclusions were drawn by Osterstock et al. (2010) about the important effect of the neighbour grains on mean grain stress distribution.

Finally, similarly to the equivalent plastic strain distributions, the mean grain axial stress distributions predicted by the three models have been renormalized by first subtracting the average value of distribution and then dividing by the standard deviation. In FIG.II-17 (d) are plotted the obtained standard distributions for polycrystalline 316L with $R_{crit}=0.95$. The standard Gaussian distribution is plotted too for comparison. It can be pointed out that even after re-normalization; the standard distributions predicted by the two self-consistent models cannot be fairly modeled by the standard Gaussian distribution. They remain strongly asymmetric and are not extended to the left side, contrarily to those obtained by the FE method, which are almost accurately described by the Gaussian standard distribution. This disagreement highlights the differences between full-field and mean-field homogenization schemes discussed above.

4.2.2. Effect of the crystalline laws

It should be noticed that for the three models, contrarily to the equivalent plastic strain distributions, the crystalline plasticity law seems to affect considerably the predicted mean grain axial stress scatter. Indeed, as it is shown in FIG.II-20, when two orientation populations are considered with $R_{crit}=0.95$, the induced mean grain stress scatter is higher than the one predicted when secondary/single slip is imposed. In the case when two orientation populations are considered, two different single crystal CSS curves are used for the adjustment of the crystalline plasticity parameters. The cyclic curves measured for the multiple slip <100> orientation exhibit a stronger hardening with respect to the single crystal orientation, which may partially explain the pronounced mean grain stress scatter when considering two orientation populations, with respect to the scatter induced using the secondary or single slip plasticity laws.

In addition, the mean grain stress scatter induced for imposed single slip seems to be larger than the one induced when secondary slip is allowed in all the grains composing the aggregate. Imposing single slip to all the grains and even at high plastic strain amplitudes leads to stronger inter-granular incompatibilities and stronger internal stresses. These plastic strain incompatibilities are lower when the activation of secondary slip is allowed in all the grains of the polycrystal.

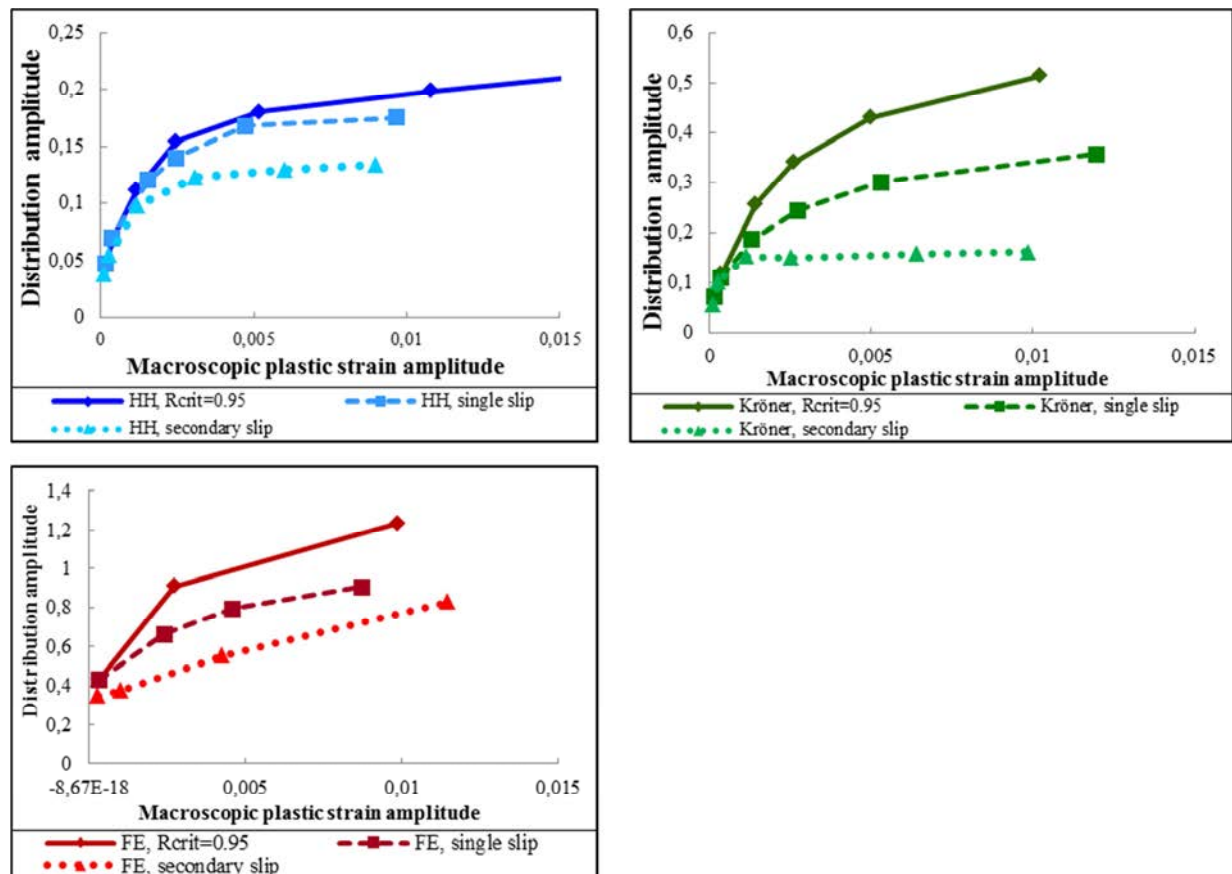


FIG. II-20: The influence of the crystalline plasticity law on the evolution with the macroscopic plastic strain amplitude of the mean grain axial stress distribution normalized amplitudes calculated by the three models, for the 316L austenitic stainless steel.

It should be noticed that the evolution with the plastic strain amplitude of the normalized standard deviation (SD) of the mean grain axial stress distributions, computed by the Kröner model, can be described by a material independent master curve. Similarly to the mean grain equivalent plastic strain distributions (see §4.1), the macroscopic plastic strain amplitude is normalized by $2\tau_0/E$, with τ_0 is the critical shear stress value and Y is the Young modulus (Hutchinson, 1970). The evolution curves with the normalized macroscopic plastic strain amplitude of the normalized SD, predicted by the Kröner model using the three crystalline plasticity laws, are plotted in FIG.II-21. The master curves obey a logarithmic law and the adjusted parameters vary from one crystalline plasticity law to another due to the more or less pronounced induced scatter. For the Hill-Hutchinson model, normalizing using the critical shear stress and the Young modulus did not allow us to get such material-independent master curve.

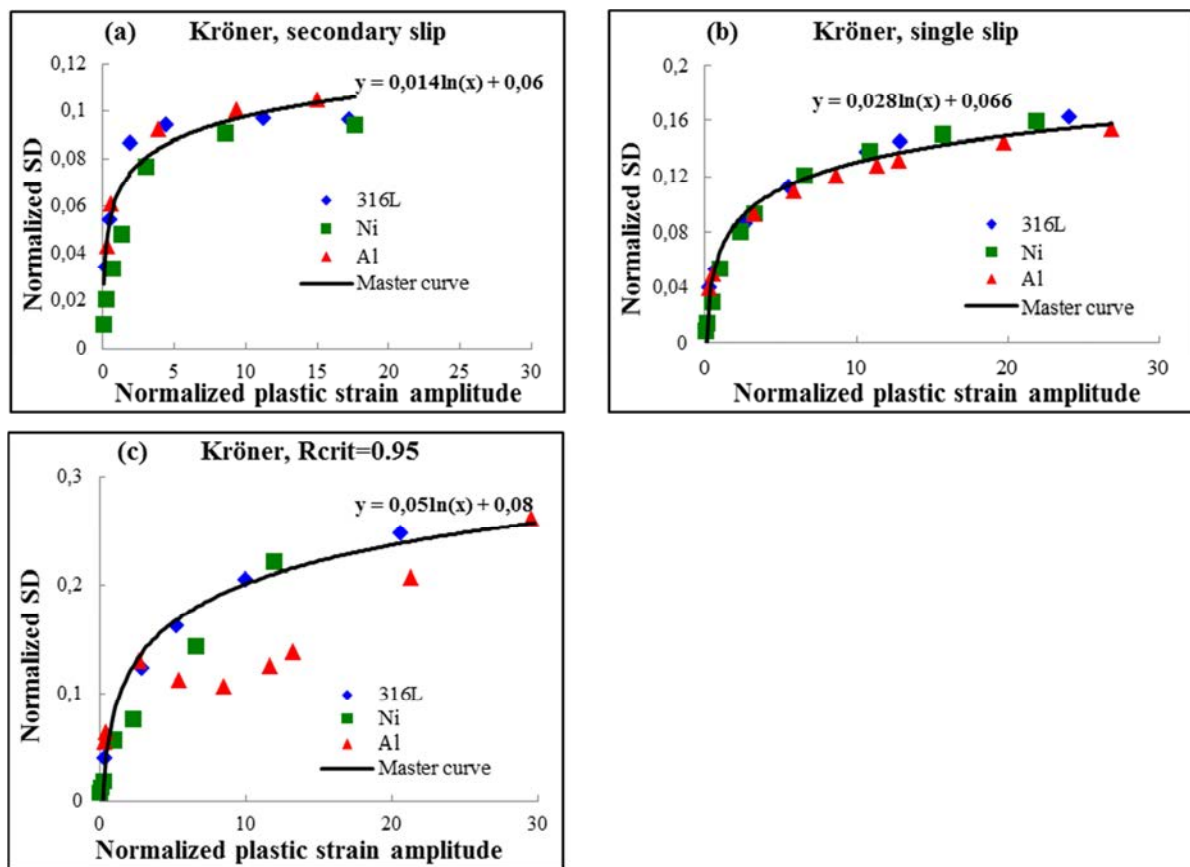


FIG. II-21: (a), (b) and (c): The evolution with the normalized macroscopic plastic strain amplitude of the mean grain axial stress normalized square deviation (SD), predicted by the Kröner model for polycrystalline 316L, Ni and Al and for the three crystalline plasticity laws. The macroscopic plastic strain amplitude is divided by $2\tau_0/Y$ where τ_0 is the critical shear stress value and Y is the Young modulus (Hutchinson, 1970).

4.2.3. Comparison with experimental data

Several data can be found in the literature concerning elastic strain measurements carried out on polycrystals using X-ray diffraction. In particular, they allow the evaluation of the inter-orientation elastic strain distribution, based on the elastic strain averaged on all grains of a particular orientation

(well-oriented, $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$). In the elastic regime, the mean orientation elastic strains are proportional to the remote stress. In all the calculations discussed before, isotropic elasticity is considered and the inter-orientation scatter, predicted by the two self-consistent models, increases as the plastic strain increases. This is in agreement with the X-ray diffraction measurements of Pang et al. (1998) carried out on Al7050 alloy polycrystals, which crystalline elasticity anisotropy coefficient is very close to 1. Similar trends have been observed by Holden et al. (1998) for polycrystalline nickel, which elasticity anisotropy coefficient is higher ($a=2.2$). Other measurements concerning 316L austenitic stainless steel, which elasticity anisotropy coefficient is higher ($a=3.4$), show a continuous increase of the inter-orientation scattering with respect to plastic strain, which is qualitatively in agreement with our computations results ([Clausen et al., 1999] and [Daymond, 2005]).

Pang et al. (1998 and 2000) compared their experimental results with simulations based on the elasto-plastic self-consistent model of Turner and Tomé (Turner and Tomé, 1994). For both Al7050 alloy (Pang et al., 1998) and 309H austenitic stainless steel (Pang et al., 2000), the model is in qualitative agreement with experimental results, but tends to overestimate the inter-granular strains due to anisotropic plastic and elastic deformation. In their works, Clausen et al., (1999) pointed out an acceptable accuracy of the incremental elasto-plastic model in predicting the uniaxial deformation of FCC polycrystals but a poorer agreement between predictions and measurements of residual lattice strain.

5. Theoretical distributions

Contrarily to FE computations, the mean grain plastic strain/stress distributions predicted by the two self-consistent models are not fairly described by the Gaussian standard distribution. It may be interesting to check if another theoretical statistical distribution may fairly describe the distributions computed by the two self-consistent models. The densities of the standard mean grain axial stress and equivalent plastic strain computed by the Kröner model for polycrystalline 316L with $R_{crit}=0.95$ are plotted in FIG.II-22 (a) and (c). The histogram in FIG.II-22 (a) gives the impression that the standard mean grain axial stress may be modeled by a classical exponential distribution. The corresponding cumulative probability function can be defined as follows:

$$F(x, \lambda, \alpha) = \begin{cases} 1 - e^{-\lambda(x-\alpha)} & \text{if } x \geq \alpha \\ 0 & \text{if } x < \alpha \end{cases}$$

The introduction of the α parameter is necessary in order to impose a threshold value different from the classical exponential one $[0, \infty)$. The two parameters of the exponential distribution law, α and λ , are adjusted so that it can describe fairly well the computed distributions, as it is shown in FIG.II-22 (b). The adjusted values of λ and α are -1.22 and 0.8 respectively. As for the mean grain equivalent plastic strain, one can notice from the histogram plotted in FIG.II-22 (c) that the computed density shape is not similar to the classical exponential one. However, a simple operation allows us to find a suitable analytical cumulative distribution function from the exponential one. The modified cumulative probability function can be written as follows:

$$F(x, \lambda, \alpha) = \begin{cases} e^{-\lambda(\alpha-x)} & \text{if } x \leq \alpha \\ 1 & \text{if } x > \alpha \end{cases}$$

In FIG.II-22 (d) are plotted the standard equivalent plastic strain distributions predicted by the Kröner model for different applied plastic strain amplitudes, for polycrystalline 316L with $R_{crit}=0.95$. The adjusted “exponential” distribution describes rather fairly the computed ones whatever the plastic strain. The adjusted values of λ and α are 1.2 and 0.85 respectively. The parameters of the laws identified above, λ and α , seem to describe fairly well the distributions computed for the three studied polycrystals (316L, Ni and Al).

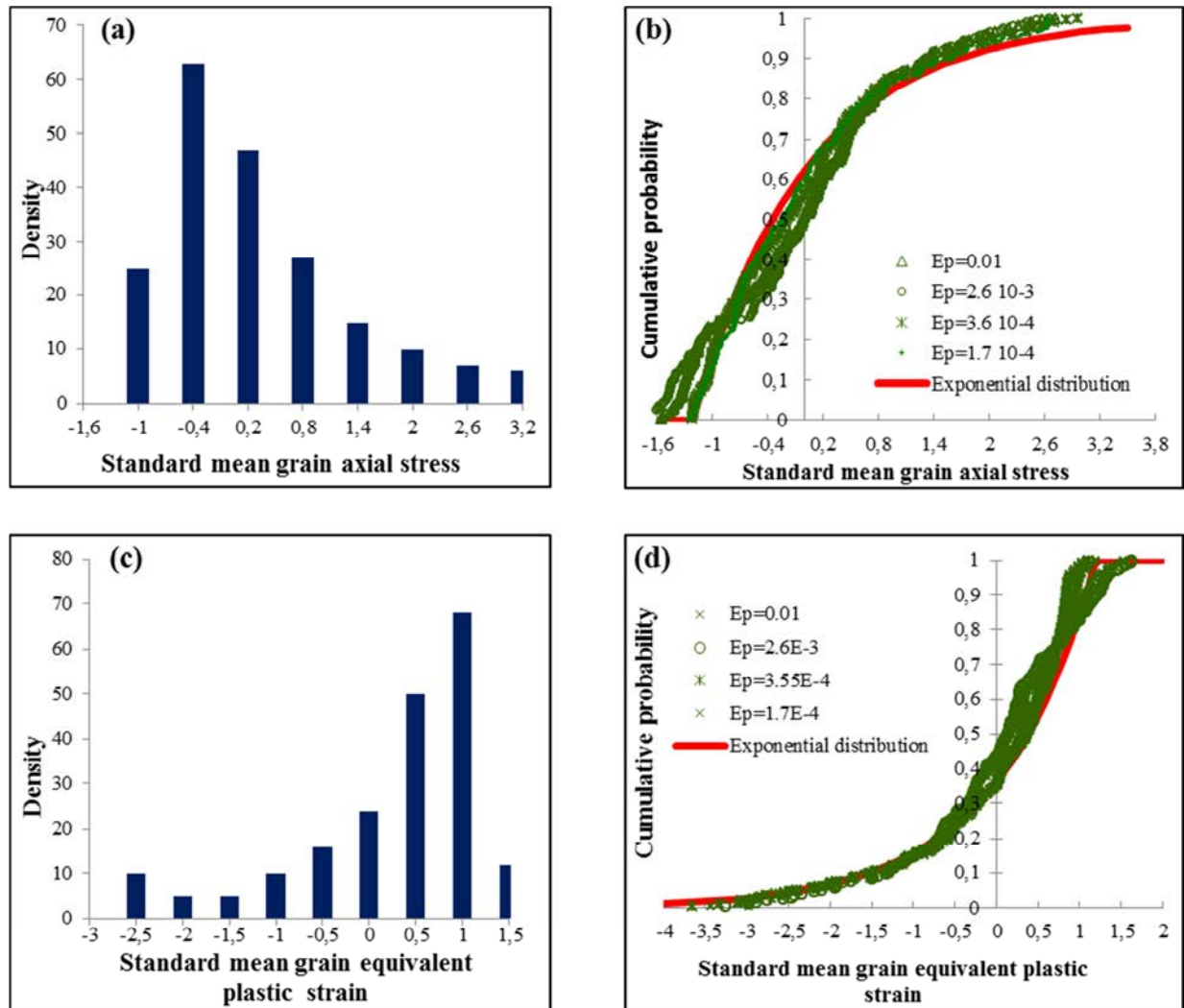


FIG. II-22: (a) and (c) the computed densities of the standard mean grain axial stress and the standard mean grain equivalent plastic strain respectively, for polycrystalline 316L, using the Kröner model with $R_{crit}=0.95$ and $\Delta E_p/2=1.7E-4$. (b) comparison between the standard mean grain axial stress distributions computed by the Kröner model and the classical exponential one for different plastic strain amplitudes, for polycrystalline 316L with $R_{crit}=0.95$. (d) comparison between the standard mean grain equivalent plastic strain distributions computed by the Kröner model for different plastic strain amplitudes and the modified exponential one, for polycrystalline 316L with $R_{crit}=0.95$. The standard mean grain stress/strain distributions are obtained from the normalized ones by first subtracting the average value (equal to 1) and then dividing by the standard deviation.

On the practical point of view, the theoretical standard distributions identified above as well as the master curves in FIG.II-16 and 21 can be easily used for a straightforward computation of the mean grain equivalent plastic strain and stress distributions. These latter are of great interest since they could be input of fatigue micro-crack nucleation models allowing the computation of the number of cycles to crack nucleation as well as the evolution of the micro-crack density ([Hoshide and Socie, 1988], [Benett and McDowell, 2003], [Osterstock et al., 2010]). These distributions can also be used in a qualitative way in order to investigate issues related to the cyclic deformation-induced martensitic transformation ([Smaga et al., 2008], [Taleb and Petit, 2006]). Indeed, this transformation may occur in grains where microplasticity and thus high internal stresses are developed. A quantitative ratio of these grains can be obtained from the predicted mean grain plastic strain/stress distributions.

6. Discussion

6.1. Effect of crystalline elasticity

In our mean field calculations, the grains are supposed to obey isotropic elasticity. However, this hypothesis does not hold for many polycrystals for which the crystalline elastic anisotropy is not negligible. The anisotropy is generally estimated by the coefficient: $a=2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$, which corresponds to the ratio between the maximum and the minimum elasticity shear moduli. For isotropic crystals, this ratio is equal to 1. The anisotropy coefficient is close to 1 for aluminum ($a=1.2$), but it is not the case for nickel ($a=2.5$), copper ($a\approx 3.3$) and 316L ($a\approx 3.4$) (Huntington, 1958). The anisotropy of crystalline elasticity seems to affect significantly the distributions of the mean orientation Schmid factor in the purely elastic regime (Sauzay, 2007). For $a>1$, the Young modulus value of well-oriented grains is lower than in the case of isotropic elasticity and consequently, the Schmid factor cumulative fraction curves are drifted towards lower values.

Hutchinson (1970) used a self-consistent model to predict the macroscopic tensile behavior of copper polycrystal, considering either isotropic or anisotropic crystalline elasticity. He underlined a stress drift of +13% in the micro-plasticity regime, when taking into account crystalline elasticity anisotropy. Brenner et al. (2009) used a new concept based on a statistical description of the local fields in order to better describe the effect of the local elastic anisotropy on the onset of plasticity in polycrystals. Either mean-field or full-field homogenization (FTT) schemes delivered realistic estimates showing a strong effect on the intragranular stress heterogeneity on the estimate of the micro yield stress.

Using FE method to predict the macroscopic cyclic behavior of Ni polycrystal, Steckmeyer et al. (2012) showed that the anisotropy of nickel crystalline elasticity induces an increase of the macroscopic stress amplitude of 10%, which is in agreement with the Hutchinson results.

The influence of the crystalline elasticity anisotropy on the mean grain plastic strain distributions seems to be much higher, in particular in the micro-plasticity regime. Using the same cyclic plastic constitutive laws, the scattering in the mean grain plastic strain is much higher when elasticity anisotropy is considered than if isotropic elasticity is. The effect of the crystalline elasticity anisotropy seems to vanish for macroscopic plastic strain amplitudes higher than few 10^{-4} (Steckmeyer et al., 2012).

6.2. Effect of crystalline plasticity parameters

In the present study, the accuracy of two different self-consistent models is discussed taking into account three distinct slip mechanisms: allowed secondary slip, imposed single slip and $R_{crit}=0.95$ with two orientation populations. The incremental localization rule of Hill-Hutchinson allows a better approximation of the FE results for the four studied polycrystals when multiple slip is allowed in all the grains composing the aggregate (latent hardening coefficient $q=1.4$). When single slip (latent hardening coefficient $q \sim 10^5$) is imposed to all, or a part of the grains composing the aggregate, the localization rule of Kröner allows more accurate predictions with respect to the FE method and experimental data while the incremental model largely underestimates the macroscopic behavior of the different studied materials. The effect of the latent hardening coefficient q on the macroscopic behavior predicted by the Hill-Hutchinson model remains weak when compared to the effect of q value on the Kröner model predictions. Similarly, distinguishing between two orientation populations seems to weakly affect the predictions of the incremental model while it allows more accurate predictions compared to FE results and experimental data.

Concerning the mean grain plastic strain/stress distribution, allowing or hindering multiple slip, does not affect the scatter predicted by the incremental self-consistent model (see FIG.II-15). On the contrary, the Kröner model predicts much lower scatter in the mean grain plastic strains when multiple slip is allowed than when single slip is imposed, which is in agreement with the trends predicted by the FE method (see FIG.II-15).

It may be kept in mind that the issues discussed above do not take into account the effect of grain size on the macroscopic cyclic behavior of FCC polycrystals. Depending on the slip mechanism governing the cyclic behavior of the studied polycrystal, the used mean-field model could lead to reasonable predictions provided the plastic slip is not strongly planar. Indeed, for planar materials such as Cu16%Al and Cu30%Zn, a non-negligible grain size effect is observed (Boutin et al., 1984) due to dislocation pile-ups or dislocation accumulation in the vicinity of grain boundaries, and the proposed crystalline model could not allow accurate predictions with respect to experimental data.

7. Simulation of complex loadings and limitations of the modelling

In addition to uniaxial tension-compression loading, numerous complex loadings have been widely studied in the literature. Therefore, in this section, the accuracy of the proposed modeling has been investigated with respect to: Average strain effect, strain memory effect, multiaxial proportional loadings and non-proportional loadings.

As shown previously, the Kröner model leads to more accurate predictions either with respect to FE results or experimental data, while the Hill-Hutchinson model largely underestimates the predicted macroscopic cyclic behavior of the FCC polycrystals studied. This discrepancy may be linked to the localization rule itself. Indeed, according to several observations reported in the literature, for plastic strain amplitudes lower than $2 \cdot 10^{-3}$ only one slip system is activated per grain and most of grains exhibit PSBs quasi-exclusively. This tendency to single slip is observed even for metals with very high

SFE like aluminum (Videm and Ryum, 1996) and nickel (Buque et al., 2001). Similar single slip microstructures were reported in lower SFE materials such as 316L (Obtlik et al., 1994) and copper ([Rasmussen and Pedersen, 1980], [Mughrabi and Wang, 1988]). Therefore, the plastic strain accommodation between neighbour grains is uneasy because of strong plastic slip incompatibilities. Each grain can be roughly considered as embedded in a quasi-elastic matrix, which corresponds to the localization rule of Kröner scheme. In contrast, in the Hill-Hutchinson scheme, the plastic strain accommodation is ensured by the more isotropic elastic-plastic deformation of the matrix which leads to much lower interaction stresses with grains deforming in single slip. This finally leads to softer predictions. Thus, in the following, only the Kröner localization rule is used. The accuracy of the proposed modelling is investigated with respect to both FE calculations and experimental observations.

7.1. Average strain effect

In order to examine the effect of the average strain value on the predictions of the models used in this study, calculations have been carried out on 316L steel aggregates using either the Kröner model or the FE method, with the same imposed total strain amplitude (0.15%) but different average strain values. FIG.II-23 presents the cyclic stress-strain loops as well as the mean grain plastic strain distributions as predicted by the Kröner model. Similar results have been obtained using FE computations. The predicted macroscopic stress amplitudes are independent of the average strain value, in agreement with previous experimental observations (Haupt and Kamlah, 1995). However, for the used total strain amplitude (0.15%), a non-zero mean stress appears and increases with increasing average strain value. Similar results have been confirmed experimentally by Aubin (2001) for a duplex stainless steel with low total strain amplitude (0.2%), but when cycling at higher strain amplitude a relaxation of the mean stress is observed. Moreover, the predicted mean grain plastic strain and stress distributions predicted by the proposed model are observed to be independent of the average strain value (FIG.II-23), in agreement with FE computations.

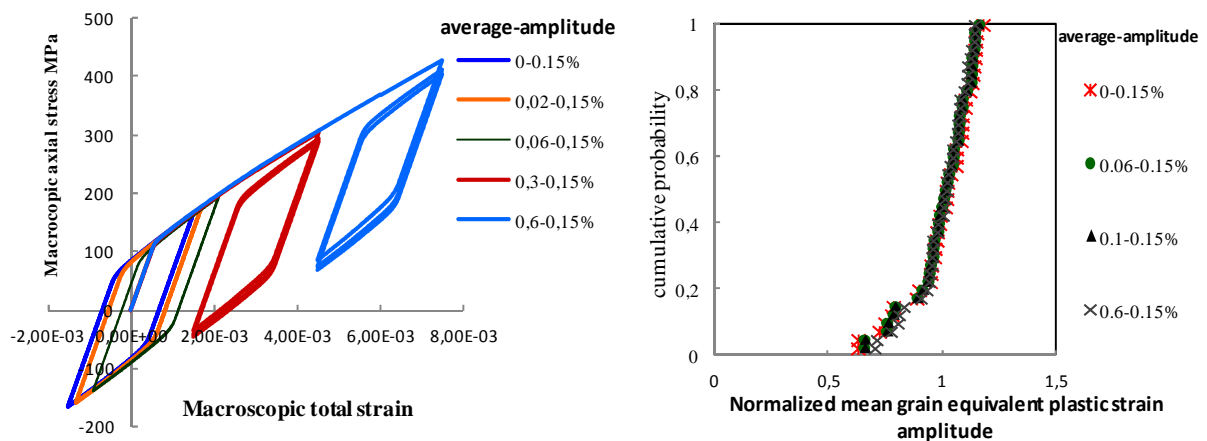


FIG. II-23: The cyclic stress-strain loops and the mean grain plastic strain distributions predicted by the Kröner model for 316L steel with the same total strain amplitude but different average strain value

7.2. Strain memory effect

Calculations have been carried out on 316L steel aggregate using both the self-consistent Kröner model and the full-field FE method, in order to investigate the predicted strain memory effect. Two-step loading sequences have been imposed. Firstly, after stabilization under certain total strain amplitude, the latter is increased. The predicted macroscopic stress amplitude after the jump is the same as that computed with the higher strain amplitude without the jump. This is in agreement with the observations of Ohmi et al. (1995) on a 316L stainless steel and those of Aubin (2011) on a duplex stainless steel. In the second simulation, a high-low loading sequence has been imposed. The polycrystal is first subjected to relatively high strain amplitude until stabilization, and then cycling under lower strain amplitude is performed. FIG.II-24 shows the macroscopic stress-strain hysteresis loops predicted by the Kröner model. Those predicted by the FE method are similar. It can be observed that the new cycle (with small strain amplitude) is stroked to the larger one at the unloading point. This same behavior has been observed experimentally for 316L steel by Chaboche et al. (1989). In addition, for the same strain amplitude (0.065% in FIG.II-24), the predicted stress amplitudes are the same with or without a jump. The predicted stress-strain hysteresis loops obtained for the lower strain amplitude (0.065%) with or without jump coincide, provided the difference between the two strain amplitudes is not significantly high (see FIG.II-24 (a)). Nonetheless, according to the experimental results obtained by Gorlier (1984) on 316L steel and Mao et al. (2010) on large grains polycrystalline copper, the stress amplitude measured with a jump is higher than the one measured without a jump, for the same final strain amplitude. The dislocation structure observed by Gorlier (1984) after a complete high-low strain amplitude test (2-0.3%) is formed essentially of cells and is dissimilar to the dislocation structure observed for the high constant strain amplitude one (2%). In contrast, for polycrystalline copper, Mao et al. (2010) showed that when the strain amplitude is decreased from 0.2% to 0.1%, the dislocation structure formed in the high strain amplitude step evolves back to loop patch structures and develops into PSB structures. Similar observations of dislocation microstructure changes have been reported by Huang (2003) for copper polycrystal (0.3%-0.1%) and by Watanabe et al. (2002) for copper single crystals (2%-0.1%).

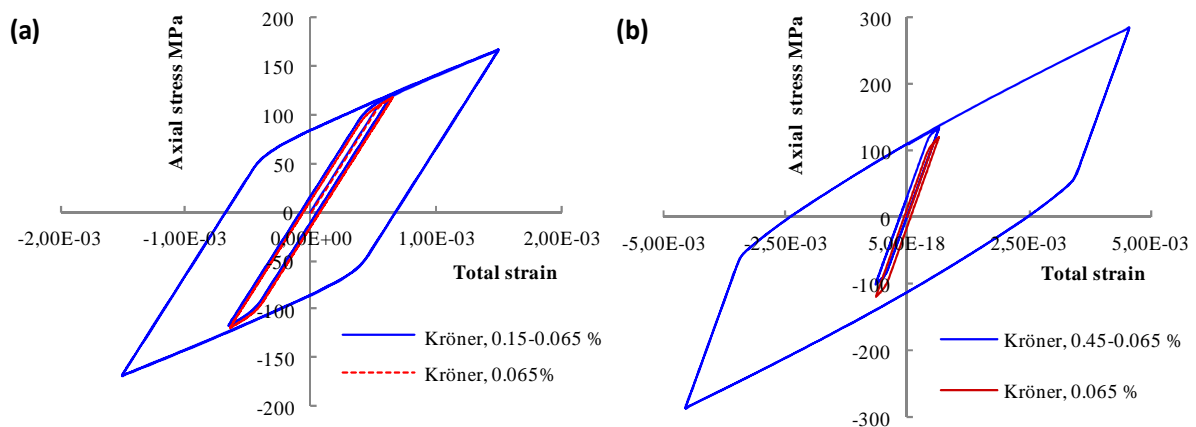


FIG. II-24: The cyclic stress-strain loops predicted by the Kröner model, for 316L steel, with high-low loading: (a) 0.15-0.065% (b) 0.45-0.065%. The cyclic stress-strain loop predicted for the low constant amplitude 0.065% is also plotted for comparison.

7.3. Multiaxial proportional loadings

Equibiaxial tension-compression and alternated torsion loadings have been simulated as well.

FIG.II-25 shows the evolution of the saturated macroscopic von Mises stress as a function of the macroscopic von Mises plastic strain amplitude, as predicted by either the Kröner model or the FE method. Experimental data are also plotted for comparison. For alternated torsion loading, the Kröner predictions agree rather well with both FE results and experimental data.

However, the Kröner model largely overestimates the macroscopic stress levels for bi-axial tension-compression loading, for plastic strain amplitudes higher than $3 \cdot 10^{-3}$. It should be noticed that the FE predictions are in fair agreement with the experimental data for all proportional investigated loadings.

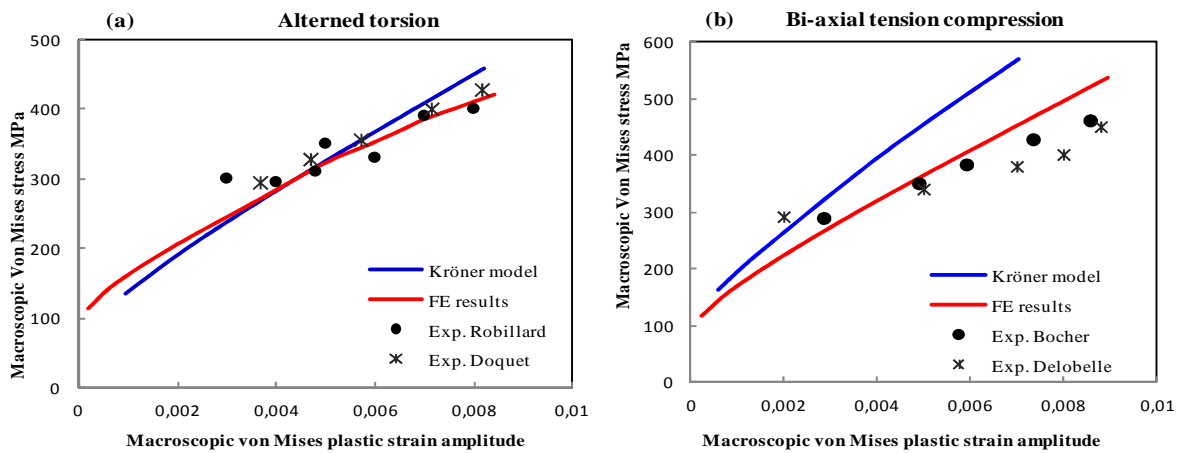


FIG. II-25: The cyclic curves predicted for 316L steel, by either the Kröner model or FE computations: (a) alternated torsion, (b) equibiaxial tension-compression. Experimental data are plotted too for comparison ([Robillard, 1989], [Doquet, 1989]).

7.4. Multiaxial non-proportional loadings

The ability of the proposed modeling to predict the effect of non-proportional loadings has been investigated as well. Two typical non-proportional loading paths, cruciform and square loadings, have been applied, for the same equivalent total strain amplitude, 0.5% (FIG.II-26). The latter is computed as follows:

$$\varepsilon_{eq}^t = \sqrt{\varepsilon_{11}^{t^2} + \frac{\gamma_{12}^{t^2}}{3}} \quad \text{with} \quad \gamma_{12}^t = 2\varepsilon_{12}^t$$

The predicted results for non-proportional loadings are presented in FIG.II-26, together with the proportional tension-compression one. Experimental data are also plotted for comparison (Benallal et al., 1989). The proposed model predicts a significant additional strengthening due to non-proportional loadings compared to proportional ones. The square loading path is observed to give the highest over-strengthening. These results are in qualitative agreement with a number of experimental investigations which highlight the significant extra hardening induced by non-proportional loadings ([Benallal et al., 1989], [Doquet and Pineau, 1990], [Bocher et al., 2001]). Based

on SEM and TEM observations, Doquet and Pineau (1990) attribute the observed over-strengthening under non-proportional loading to an increase of the number of active slip systems due to the rotation of the principle stress axes, which triggers latent hardening. TEM observations revealed cells and microtwins under non-proportional loadings, in definite contrast with single slip arrangements as was the case of proportional loadings (Doquet and Pineau, 1990). The TEM investigations of Bocher et al. (2001), carried out for different loading paths, lead to similar conclusions. The fraction of the investigated grains presenting planar slip is higher than 40% under uniaxial and proportional loadings (94% under tensile loading), whilst cells were observed in 90% of the grains for non-proportional loadings inducing higher over-hardening. Furthermore, the evaluation of both the intragranular and the intergranular backstresses shows that the over-strengthening induced by non-proportional loadings is not only linked to slip multiplicity, but also to an increase of the intragranular backstress, that results from the development of heterogeneous dislocation structures (Bocher et al., 2001).

With reference to FIG.II-26, it is shown that the proposed model qualitatively predicts the over-strengthening due to these non-proportional loadings. Nevertheless, the polycrystalline model largely overestimates the stress levels compared to experimental results. On account of the lack of experimental data, the crystalline plasticity laws are adjusted using single crystal uniaxial cyclic stress-strain curves only and therefore, the mechanisms related to non-proportional loadings are not well described at the single crystal scale. Additional experimental investigations of slip mechanisms at the single crystal scale under non-proportional loadings are thus required and may result in an improvement of the crystal plasticity laws and finally of the proposed model accuracy. For instance, the latent hardening parameter, q , may be more accurately adjusted using non-proportional test results carried out on single crystals in order to better taking into account complex loadings. The backstress hardening law may be improved as well based on similar test results.

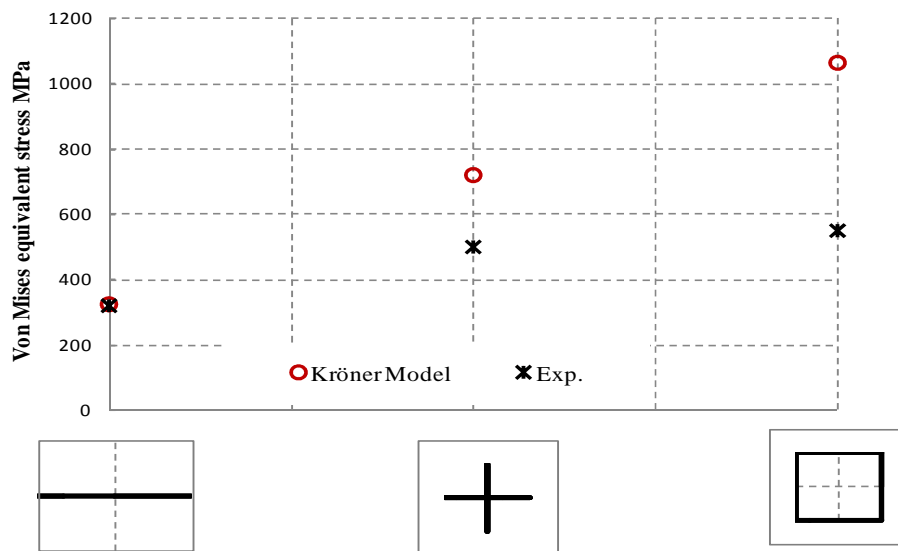


FIG. II-26: Predicted von Mises stress values predicted by the Kröner model for three loading paths: Tension-compression, cruciform and square loadings. Experimental data are plotted too for comparison (Benallal et al., 1989). 316L stainless steel, total von Mises strain amplitude 0.5%.

8. Conclusions

The Kröner and the Hill-Hutchinson incremental homogenisation models are used to predict the macroscopic cyclic behaviour as well as the mean grain plastic strain/stress distributions of face-centred cubic (FCC) polycrystals at room temperature. The predictive ability of the two self-consistent models is studied for four different FCC polycrystals (316L austenitic stainless steel, copper, nickel and aluminium), either with comparison with FE calculation results carried out on large aggregates or with experimental data provided by literature.

As a first step, only grains oriented for single slip are considered and the activation of secondary slip system is either allowed or hindered. For the four studied polycrystals, the Hill-Hutchinson model predictions are in fair agreement with the FE results when secondary slip is allowed in all the grains composing the aggregate while the Kröner model slightly overestimates the macroscopic stress levels at large plastic strain amplitude. That confirms previous conclusions obtained in the case of tensile loadings. On the contrary, when single slip is assigned to all the grains of the aggregate, the Kröner model allows very accurate predictions with respect to the FE results while the incremental one leads to a large underestimation of the macroscopic behaviour.

In order to take into account the experimentally observed correlation between the dislocation arrangements and the corresponding single crystal orientations, the grains composing the aggregate are separated into two orientation families. The first orientation population gathers crystals oriented for single slip, located at the central area of the standard triangle (ST), which display bundle and slip bands dislocation structures. The second population gathers grains oriented for multiple slip, located at the periphery of the ST, in which labyrinth and wall dislocation structures are usually observed. For each family, the crystalline plasticity parameters are adjusted using one experimental single crystal CSS curve. For the four studied polycrystals, the macroscopic CSSCs as well as the hysteresis loops predicted by the Kröner model are in a very good agreement with the FE results, while the incremental model largely underestimate the macroscopic stress levels, especially at intermediate to high plastic strain amplitudes. Both the Kröner and the FE results are in fair agreement with the available experimental data provided the grain size is not too small and the macroscopic plastic strain not too low.

Whatever the material, the chosen crystalline plasticity law and the used self-consistent model, the distributions of the mean grain equivalent plastic strains become more scattered and broader as the macroscopic plastic strain amplitude decreases. This result is in agreement with the heterogeneous dislocation structures observed at low plastic strain and the larger scatter in fatigue lifetime in the high-cycle fatigue regime (low plastic strain) than in the low-cycle fatigue regime (high plastic strain). On the contrary, the mean grain axial stress distributions become more and more scattered with increasing plastic strain, in agreement with the trends measured by X-ray diffraction. Nevertheless, the used self-consistent models neglect the large effect of the neighbouring grains on the mean stress/strain state of a given grain within a polycrystal, which may explain the discrepancy between the mean grain plastic strain/stress distributions predicted by the self-consistent models and the FE method. Indeed, if we consider the overall mean grain plastic strain scatter amplitude predicted by FE calculations, and the inter-orientation scatter amplitude predicted by the Kröner model, the intra-orientation scatter amplitude is between 1.5 and 2 times the inter-orientation one. This neighbouring

grains effect explains the “high value tail” observed in mean grain plastic strain distributions predicted by the FE method contrarily to those predicted by the two self-consistent models. The mean grain stress scatter predicted by the incremental model is lower than those predicted by both the Kröner one and the FE method, probably due to the soft interaction between a given grain and the surrounding matrix imposed in the incremental approach. For each crystalline plasticity law, the evolution with the normalized plastic strain amplitude of the normalized amplitude/ square deviation (SD) of the mean grain plastic strain/stress distributions predicted by the Kröner model can be described by material independent master curves which parameters are identified in this study. Two “exponential” statistical distributions are adjusted to allow a fair description of the mean grain plastic strain/stress distributions predicted by the Kröner model. Similar statistical approach has been applied to distributions computed by the FE method but using Gaussian distribution.

On the practical point of view, the adjusted theoretical statistical distributions and the identified master curves of the mean grain distributions parameters (amplitude and SD) can be easily used to compute the mean grain plastic strain/stress distributions for a given macroscopic plastic strain amplitude, for either mean-field or full-field approaches. These distributions may then be used as inputs of fatigue microcrack, cavity or new phase nucleation criteria.

Finally, the ability of the micro-mechanical modelling to predict the influence of complex loadings including mean strain effect or strain memory effect, as well as multiaxial and non-proportional loadings has been investigated. It has been shown that the predictions are in qualitative agreement with the available experimental data reported in literature except for strain memory effect.

9. References

- Armstrong, P.J., Frederick, C.O., 1966. CEGB Report No. RD/B/N 731, Berkeley Nuclear Laboratories, Berkeley, UK.
- Basinski, Z.S., Korbelt, A.S., Basinski, S.J., 1980. *Acta Metallurgica*. 28, p. 191.
- Barbe, F., Decker, L., Jeulin, D., Cailletaud, G., 2001a. *International Journal of Plasticity*. 17, p. 513.
- Barbe, F., Forest, S., Cailletaud, G., 2001b. *International Journal of Plasticity*. 17, p.537.
- Bari, S., Hassan, T., 2002. *International journal of plasticity*. 18, p. 873.
- Bennett, V.P., McDowell, D.L., 2003. *International Journal of Fatigue*. 25, p. 27.
- Berveiller, M., Zaoui, A., 1979. *J. Mech. Phys.* 26, p. 325.
- Berveiller, M., Audit, P., Baro, R., 1972. *Revue de Physique Appliquée* 7, p. 283-290.
- Blochwitz, C., Veit, U., 1982. *Crystal Res. & Technology*. 17, p. 529-551.
- Blochwitz, C., Brechbühl, J., Tirschler, W., 1996. *Material Sciences and Engineering A*. 210, p. 42.
- Boulanger, L., Bisson, A., Tavassoli, A.A., 1985. *Philos Mag A*, 51, L5-L11.
- Boutin, J., Marchand, N., Bâillon, J-P., Dickson, J.I., 1984. *Mater. Sci. Eng.* 67, L23-7.
- Brenner, R., Lebensohn, R. A., Castelnau, O., 2009. *International Journal of Solids and Structures*, vol.46, p. 3018-3026.
- Buque, C., 2001. *International Journal of Fatigue*. 23, p. 671.
- Buque, C., Bretschneider, J., Schwab, A., Holste, C., 2001a. *Materials Science and Engineering A*. 300, p. 254.
- Buque, C., Bretschneider, J., Schwab, A., Holste, C., 2001b. *Materials Science and Engineering A*. 319-321, p. 631.
- Cailletaud, G., Pilvin, P., 1994. *Rev. Eur. EF* 3, 1994. 515-541
- Chaboche, J.L., Dang-Van, K., Cordier, G., 1979. In: *Proceedings of the Fifth International Conference on SMiRT*, Div. L, Berlin, Germany, L11/3.
- Chaboche, J.L., 2008. *International journal of plasticity*. 24, p. 1642.
- Cheng, A.S., Laird, C., 1981. *Materials Science and Engineering*, 51, p. 111.
- Clausen, B., Lorentzen, T., Bourke, M.A.M., Daymond, M.R., 1999. *Material Science and Engineering A*. 259, p. 17.
- Daymond, M.R., 2005. *Mat. Sci. Forum*. 495-497:1019.
- Déprés, C., Fivel, M.C., Tabourot, L., 2008. *Scripta Materialia*. 50, p. 1086-1089.
- El-Madhoun ,Y., Mohamed, A., Bassim, M.N., 2003. *Materials Science and Engineering A*. 359, p. 220-227.
- Eshelby, J.D., 1957. *Proc. R. S. Lond.* 1957. 241, p. 376.
- Evrard, P., Aubin, V., Pilvin, Ph., Degallaix, S., Kondo, D., 2008. *Mechanics Research Communications*. 35, p. 336-343.
- Feaugas, X., 2003. *Recent Res. Devel. Mat. Sci.*, 4, 35-64.
- Feaugas, X., Pilvin, P., 2009. *Advanced Engineering Materials*, 11, 703-709.
- Franciosi, P., Berveiller, M., Zaoui, A., 1980. *Acta Metall.*, 28, 273-83.
- Franciosi, P., 1985. *Acta Metall.*, 33, 1601-1612.
- Gérard, C., Bacroix, B., Bornert, M., Cailletaud, G., Crépin, J., Leclercq, S., 2009. *Computational Materials Science*. 45, p. 751-755.
- Gerland, M., Alain, R., Ait Saadi, B., Mendez, J., 1997. *Materials Science and Engineering A*. 229, p. 68
- Giese, A., Styczynski, A., Estrin, Y., 1990. *Materials Science and Engineering A*. 124: L11.
- Gilormini, P., Germain, Y., 1987. *Int. J. Solids Struct.* 23, p. 413-437.
- Gilormini, P., Michel, J.C., 1999. *Eur. J. Mech. A/Solids*. 17, p. 725-740.
- Gorlier, C., 1984. *Mécanismes de fatigue plastique de l'acier 316L sous formes monocristalline et polycristalline*. Thèse Ecole des Mines de Saint Etienne (1984).
- Guilhem,Y., 2011. *Numerical investigation of the local mechanical fields in 316L steel polycrystalline aggregates under fatigue loading*. Thèse Ecole des Mines de Paris (2011).

Haddou, H., Risbet, M., Marichal, G., Feaugas, X., 2004. *Materials Sciences and Engineering A*. 379, p. 102-111.

Holden, T.M., Holt, R.A., Clarke, A.P., 1998. *Mat. Sci. Eng. A*. 246:180.

Hoshide, T., Socie, D.F., 1988. *Eng. Fract. Mech.* 29, p. 287-99

Hill, R., 1965. *J. Mech. Phys. Sol.* 13, p. 89.

Hlilou, A., Ben Naceur, I., Sai, K., Gérard, C., Forest, S., Cailletaud, G., 2009. *Computational Materials Science*. 45, p. 1104-1112.

Huntington, H., 1958. *Solid-State Physics*. 7, p. 214-351.

Hutchinson, J.W., 1970. *J. Mech. Phys. Sol.* 19, p. 247.

Idiart, M.I., Moulinec, H., Ponte Castenada, P., Suquet, P., 2006. *J. Mech. Phys. Sol.* 54, p. 1029.

Jia, Y., Morrisson, D.J., Moosbrugger, J.C., 2008. *Mater. Sci. Eng. A*. 492, p. 80.

Jiang, Y., Kurath, P., 1995. *International journal of plasticity*. 12, p. 387.

Jin, N.Y., Winter, A.T., 1984. *Acta Metall.*, 32, 989-995

Kouddane, R., Molinari, A., Canova, G.R., 1993. In: Teodosiu et al. (Eds.), *Large Plastic Deformation*. Balkema, Rotterdam, p. 129-141.

Krishna, S., Hassan, T., Ben Naceur, I., Sai, K., Cailletaud, G., 2009. *International journal of plasticity*. 25, p. 1910

Kröner, E., 1961. *Acta Mater.* 9, p. 155.

Lebensohn, R.A., Tomé, C., 1993. *Acta Metall. Mater.* 41, p. 2611-2624.

Lebensohn, R.A., Liu, Y., Ponte Castenada, P., 2004. *Acta Materialia*. 52, p. 5347.

Lebensohn, R.A., Kanjarla, A.K., Eisenlohr, P., 2012. *International journal of plasticity*. 32-33, p. 59.

Lemaitre, J., Chaboche, J.L. *Mécanique des Matériaux Solides*. Dunod.

Li, P., Zhang, Z.F., Li, X.W., Li, S.X., Wang, Z.G., 2009. *Acta Materialia*. 57, p. 4845.

Li, Y., Laird, C., 1994. *Materials Science and Engineering A*. 186, p. 65.

Lienert, U., Han, T.-S., Almer, J., Dawson, P.R., Leffers, T., Margulies, L., Nielsen, S.F., Poulsen, H.F., Schmidt, S., 2004. *Acta Materialia*. 52, p. 4461.

Liu, Y., Ponte Castañeda, P., 2004. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 52, p. 467-495.

Liu, C.D., You, D.X., Bassim, M.N., 1994. *Acta Metall.* 42, 1631.

Lukas, P., Kunz, L., 1996. In: Arsenault, R.J., Cole, O., Kistorz, G., Liaw, P.K., Parameswaran, S., Sizek, H., editors. *The Minerals, Metals and Materials Society*, 279-290.

Man, J., Obrtlík, K., Blochwitz, C., Polak, J., 2002. *Acta Materialia*. 50, p. 3767.

Masson, R., Bornet, M., Suquet P., Zaoui, A., 2000. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 48, p. 1203.

Mecking, H., Kocks, U.F., 1981. *Acta Metall.* 29, 1865-1875.

Mecke, K., Blochwitz, C., 1982. *Crystal Res. & Technology*. 17, p. 743-758.

Mercier, S., Jacques, N., Molinari, A., 2005. *Int. J. Solids Struct.* 42, p. 1923-1941.

Méric, L., Cailletaud, G., 1991. *J. of Engng. Mat. Technol.* 113, p. 171-182.

Molinari, A., Canova, R.G., Ahzi, S., 1987. *Acta Metall.* 35, p. 2983.

Molinari, A., Tòth, L.S., 1994. *Acta Metall. Mater.* 42, p. 2453.

Molinari, A., Ahzi, S., Kouddane, R., 1997. *Mechanics of Materials*. 26, p. 43-62.

Molinari, A., El Houdaigui, F., Toth, L.S., 2004. *International Journal of Plasticity*. 20, p. 291.

Morrison, D.J., 1994. *Materials Science and Engineering A*. 187, p. 11.

Morrison, D.J., Moosbrugger, J.C., 2001. *Materials Science and Engineering A*. 314, p. 24-30.

Moulinec, H., Suquet P., 1998. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 157, p. 69.

Mughrabi, H., Wang, R., 1988. In *Basic Mechanisms in Fatigue of Metals*, *Materials Science Monographs*. 46, p. 1-14.

Obrtlík, K., Kruml, T., Polak, J., 1994. *Materials Science and Engineering: A*. **187**, p. 1.

Osterstock, S., Robertson, C., Sauzay, M., Aubin, V., Degallaix, S., 2010. *Materials Science and Engineering A*. 528, p. 379-390.

Pang, J.W.L., Holden, T.M., Mason, T.E., 1998. *Acta Materialia*. 46, p. 1503.

Pang, J.W.L., Holden, T.M., Wright, J.S., Mason, T.E., 2000. *Acta Materialia*. 48, p. 1131-1140.

Peirce, D., Asaro, R.J., Needleman, A., 1983. *Acta Metall.* 31, p. 1951-1976.

Pilvin, P., 1990. Approches multiéchelle pour la prévision du comportement anélastique des métaux. Thèse de Doctorat.

Pilvin, P., 2003. SIDOLO, version 2.4495, notice d'utilisation, Université de Bretagne-Sud.

Polak, J., Obertlik, K., Hajek, M., 1994. *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.* 17, p. 773-782.

Ponte Castañeda, P., 1991. *J. Mech. Phys. Sol.* 39, p. 45-71.

Ponte Castañeda, P., 1996. *J. Mech. Phys. Sol.* 44, p. 827-862.

Ponte Castañeda, P., 2002. *J. Mech. Phys. Solids*. 50, p. 737-757.

Pratt, 1967: Pratt, J.E., 1967. *Acta Metallurgica*. 15, p. 127.

Quilici, S.P., Cailletaud, G., 1999. *Computational Materials Science*. 16, p. 383.

Rasmussen, K.V., Pedersen, O.B., 1980. Fatigue of copper polycrystals at low plastic strain amplitudes. *Acta Metallurgica*. 28, p. 1467.

Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., Tjahjanto, D.D., Bieler, T.R., Raabe, D., 2010. *Acta Materialia*. 58, p. 1152-1211.

Sachs, G., 1928. *Z. Ver. dt Ing.* 1928. 14, p. 1467.

Sauzay, M., 2007. *Acta Materialia*. 55, p. 1193.

Sauzay, M., Evrard, P., Steckmeyer, A., Ferrié, E., 2010. *Procedia Engineering*. 2, p. 531-540.

Sauzay, M., Jourdan, T., 2006. *International Journal of Fracture*. 141, p. 431-446.

Sauzay, M., 2009. Habilitation à diriger des recherches, Université Paris VI, France.

Sauzay, M., Man, J., 2008. *Mater. Sci. Forum*. 567-568, p. 149-52.

Sauzay, M., 2008. *International journal of plasticity*. vol. 24, p. 727.

Sauzay, M., Kubin, L.P., 2011. *Progress in Materials Science*, 56, 725–784.

Schwab, A., Holste, C., 2002. *Acta Materialia*. 50, p. 289.

Smaga, M., Walther, F., Eifler, D., 2008. *Mat. Sci. Eng. A*. 483-484, p. 394-397.

Steckmeyer, A., Sauzay, M., Weidner, A., Hieckmann, E., 2012. *International Journal of Fatigue*. 40, p. 154–167.

Suquet, P., 1995. *C. R. Acad. Sci. Paris II* 320.

Tabourot, L., Fivel, M., Rauch, E., 1997. *Materials Science and Engineering A*. 234-236, p. 639-642.

Taleb, L., Petit, S., 2006. *International journal of plasticity*. 22, p. 110.

Taylor, G., 1938. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*. 62, p. 307-324.

Toth, L.S., Molinari, A., Zouhal, N., 2000. *Mechanics of Materials*, 32. 99-113.

Turner, P.A., Tomé, C.N., 1994. *Acta metall.* 42, p. 4043

Videm, M., Ryum, N., 1996a. *Materials Science and Engineering A*. 219, p. 11.

Videm, M., Ryum, N., 1996b. *Mater Sci Eng A*, 219, 1–10.

Vorren, O., Ryum, N., 1987. *Acta Metallurgica*. 35, p. 855.

Vorren, O., Ryum, N., 1988. *Acta Metallurgica*. 36, p. 1443.

Winter, A.T., Pedersen, O.B., Rasmussen, K.V., 1980. *Acta Metallurgica*. 29, p. 735-748.

Weidner, A., Blochwitz, C., Skrotzki, W., Tirschler, W., 2008. *Materials Science and Engineering A*. 479, p. 181.

Zhai, T., Martin, J.W., Briggs, G.A.D., 1996. *Acta Materialia*. 44, p. 1729.

Zouhal, N., Molinari, A., Toth, L.S., 1996. *International Journal of Plasticity*, 12, 343-360.

III. Vers une modélisation basée sur les densités de dislocations : validation en déformation monotone à température ambiante

1. Introduction

L'objectif de ce chapitre est de proposer un modèle permettant de prédire le comportement des métaux et alliages CFC en traction monotone à température ambiante. Les lois introduites dans le modèle font appel aux densités de dislocations comme variables internes et permettent une description physique des différents mécanismes mis en jeu au cours de la déformation. L'introduction de ces variables internes est nécessaire en vue de l'étude de la fatigue à haute température pour laquelle la restauration des dipôles de dislocations doit être prise en compte explicitement. L'application à la déformation monotone à température ambiante permet une première application plus simple de ces concepts. De plus, l'existence de nombreuses données expérimentales dans la littérature a permis l'identification des paramètres cristallins.

La première partie de ce chapitre présente une brève revue bibliographique dont l'objectif est d'introduire les mécanismes de déformation dans les monocristaux et polycristaux de structure cubique à faces centrées (CFC). Un bilan sur la nature des interactions entre dislocations et l'effet de différents paramètres (taille des grains, orientation cristalline ...) sur le comportement du matériau est également présenté.

La deuxième partie est consacrée à la présentation du modèle monocristallin utilisé. Les différents mécanismes physiques gouvernant l'écrouissage sont présentés et les lois d'évolution adoptées pour décrire l'écrouissage et l'écoulement sur chaque système de glissement sont détaillées.

Les troisième et quatrième parties de ce chapitre concernent la description d'une étape clé de ce travail, à savoir l'identification des différents paramètres du modèle ainsi que la proposition d'un critère permettant de prendre en compte la dépendance du comportement du monocristal/grain vis-à-vis de son orientation cristallographique.

Enfin, la dernière partie du chapitre concerne la validation qualitative du modèle pour différents métaux et alliages CFC en traction monotone à température ambiante. Différents aspects sont alors abordés et la validité du modèle monocristallin est discutée dans le cadre de l'introduction de deux approches d'homogénéisation polycristalline à champs moyens, décrites dans le chapitre précédent.

2. Revue bibliographique

2.1. Déformation monotone des monocristaux CFC

2.1.1. Mécanismes et systèmes de glissement

Dans les matériaux cristallins, la déformation plastique résulte principalement du mouvement des dislocations dans leurs plans de glissement. Les dislocations mobiles sont produites par des mécanismes de multiplication comme les moulins de Frank et peuvent être éliminées soit en surface en y laissant une marche résiduelle, soit annihilées par recombinaison avec d'autres dislocations de signes opposés. Par ailleurs, cette annihilation étant incomplète, les dislocations peuvent être bloquées par interaction avec différents obstacles, notamment avec d'autres dislocations dites de la « forêt ». Ces dislocations sont ainsi stockées dans le cristal induisant un durcissement du matériau.

Pour une étude plus complète des mécanismes de plasticité, le lecteur peut se référer aux ouvrages de François, Pineau et Zaoui (1991) et de Friedel (1964).

Dans le cas des métaux et alliages CFC, les dislocations peuvent glisser sur 12 systèmes de glissement différents, correspondant à 4 plans de type {111} et 3 directions pour chaque plan de type <110>. Ces systèmes sont rappelés dans TAB.III-1, selon les notations de Schmid et Boas (1935).

Système	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
Plan		$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$			111			$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$			$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$	
direction	$0\bar{1}1$	101	110	$0\bar{1}1$	$10\bar{1}$	$\bar{1}10$	011	101	$\bar{1}\bar{1}0$	011	$10\bar{1}$	110

TAB.III-1 : Définitions des systèmes de glissement du cristal CFC. Schmid et Boas (1935)

La contrainte résolue sur un système de glissement (s) est reliée à la contrainte macroscopique (à l'échelle du monocristal) via le tenseur de d'orientation $\underline{\underline{m}}^s$:

$$\tau^s = \underline{\underline{\sigma}} : \underline{\underline{m}}^s$$

Le tenseur $\underline{\underline{m}}^s$ décrit les caractéristiques géométriques du système de glissement s par la relation suivante :

$$\underline{\underline{m}}^s = \frac{1}{2}(\underline{\underline{m}}^s \otimes \underline{\underline{n}}^s + \underline{\underline{n}}^s \otimes \underline{\underline{m}}^s)$$

$\underline{\underline{m}}^s$ et $\underline{\underline{n}}^s$ sont respectivement la direction unitaire de glissement et la normale unitaire au plan de glissement.

2.1.2. Stades de déformation des monocristaux CFC en traction monotone uni-axiale

Pour les monocristaux de structure cubique à faces centrées, la courbe de traction présente trois stades caractéristiques. Ces stades sont schématiquement illustrés sur la figure FIG.III-1a. La figure FIG.III-1b présente les courbes de tractions expérimentales obtenues sur des monocristaux de cuivre de différentes orientations cristallographiques (Kocks and Mecking, 2003).

Stade I : appelé aussi stade de glissement facile, est caractérisé par un faible taux d'écroutissage ($\mu/3000$) et de faibles densités de dislocations (jusqu'à 10^{12}m^{-2} dans le cuivre à 300K, (Sauzay and Kubin, 2011)). Seul le système primaire est activé et les dislocations mobiles sur ce système interagissent avec la densité des dislocations de forêt initiale du cristal. La densité des dislocations immobiles augmente progressivement avec la déformation plastique et des phénomènes d'annihilation se produisent. La microstructure est formée essentiellement de denses paquets de dislocations (bundles) parallèles à la ligne de dislocation coin du système primaire (Chiu and Vessière, 2008). Ces paquets contiennent une densité importante de boucles prismatiques ainsi que

de longues lignes de type coin souvent crantées et une faible densité des dislocations vis due à leur annihilation mutuelle par glissement dévié.

Stade II : ce stade se caractérise par l'activation du système secondaire. Les interactions entre dislocations primaires et secondaires se multiplient et forment des barrières de type Lomer-Cottrell (Hirth and Lothe, 1992). La densité des dislocations immobiles (stockées) augmente significativement induisant un fort taux d'écrouissage, de l'ordre de $\mu/300$. La microstructure de dislocations devient de plus en plus complexe, avec la formation de zones denses, plus ou moins parallèles au plan du système primaire et contenant les dislocations primaires et secondaires ainsi que des jonctions. Ces zones sont séparées par des régions de faible densité de dislocations.

Stade III : ce stade se caractérise par une réduction du taux d'écrouissage qui devient semi-parabolique. Les contraintes étant élevées, des mécanismes d'annihilation et de restauration dynamique s'activent. La valeur de la contrainte seuil τ_{III} est généralement admise comme la contrainte critique pour l'annihilation des dislocations vis par glissement dévié. Cette contrainte dépend fortement de la température (Mitchell, 1964) ainsi que de l'énergie de défaut d'empilement (Sansal, 2007).

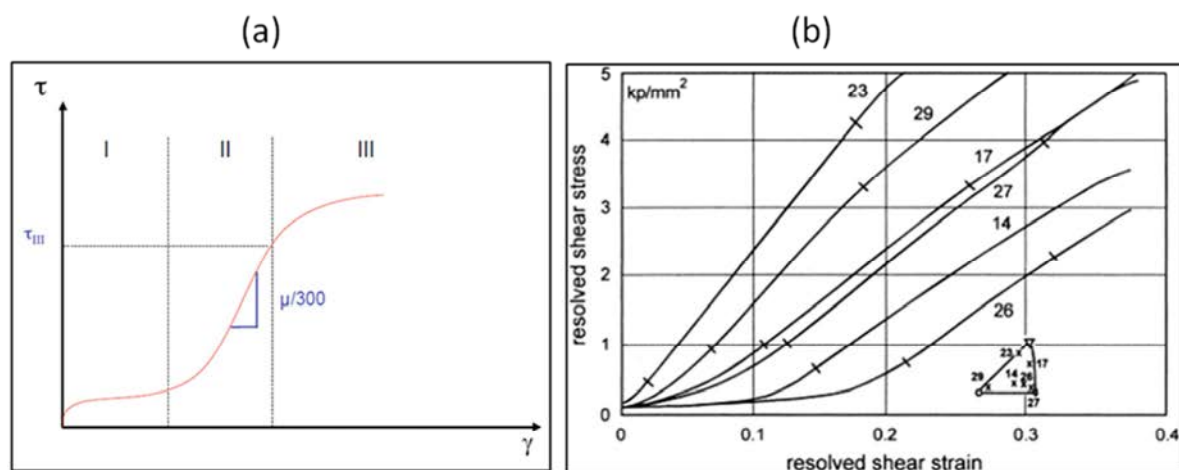


FIG. III-1 : (a) courbe de déformation typique d'un monocristal CFC (Sansal, 2007). (b) courbes de traction expérimentales de monocristaux Cu de différentes orientations à température ambiante (Kocks and Mecking, 2003).

2.1.3. Interactions entre dislocations

Le durcissement dans les métaux CFC est directement lié aux interactions entre dislocations. Il existe différents types d'interaction entre les systèmes de glissement. Seules les dislocations dont les lignes sont sécantes, dites arbres de forêts, sont considérées comme obstacles potentiellement durcissant. Dans le cas des dislocations parfaites dont les systèmes sont sécants, ces interactions peuvent conduire à différentes configurations, toutes conduisant à la formation d'un nouveau segment appelé jonction. Les travaux de Saada (1960) et de Friedel (1964) stipulent, en effet, que la formation

d'une jonction est accompagnée d'une minimisation de l'énergie totale des lignes de dislocations. On distingue trois types de jonction : la jonction de Hirth, la jonction glissile et la jonction de Lomer.

En plus des interactions entre systèmes sécants, trois autres interactions peuvent avoir lieu, à savoir : l'interaction d'un système avec lui-même (auto-écrouissage), l'interaction entre systèmes coplanaires et enfin l'interaction entre un système et son système dévié (colinéaire).

De nombreuses études ont été menées afin de décrire et de quantifier expérimentalement ces différentes interactions. Basinski and Basinski (1979) ont proposé un premier classement des interactions entre systèmes de glissement en compilant des résultats obtenus sur du cuivre en glissement simple. Selon cette synthèse, les interactions de type Lomer, glissile et colinéaire seraient très fortes, l'interaction de Hirth serait forte tandis que l'interaction coplaire serait faible. Plus tard, Franciosi et al. (1980) puis Wu et al. (1991) ont menés des essais de traction avec changement de trajet sur des monocristaux de cuivre, le but étant d'estimer l'écrouissage latent. Le principe consiste à pré-déformer le monocristal en glissement simple afin de densifier en dislocations un des systèmes de glissement. Ensuite, un nouvel axe de chargement est choisi de manière à se trouver en glissement simple sur un des systèmes sécants au premier. A l'issue de cette étude, Franciosi et al. (1980) ont proposé un classement des interactions très différent de celui de Basinski and Basinski (1979). Ainsi, l'interaction de Lomer serait la plus forte, ensuite l'interaction de type glissile et enfin les interactions de types Hirth, coplaire et colinéaire seraient les plus faibles. En 1991, Bassani and Wu (1991) ont proposé à partir de leurs résultats expérimentaux un nouveau classement de ces interactions, par ordre croissant : auto-écrouissage, colinéaire, Hirth, coplaire, glissile et Lomer.

De plus, Franciosi (1978, 1984) a proposé une écriture de ces interactions sous forme d'une matrice symétrique (FIG.III-2). Les termes diagonaux de la matrice (h_0) représentent l'auto-écrouissage. Les autres coefficients caractérisent l'interaction coplaire (h_1), la jonction de Hirth (h_2), l'interaction colinéaire (h_3), la jonction glissile (h_4) et les verrous de Lomer (h_5).

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
A2	h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4	h_2	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4
A3	h_1	h_0	h_1	h_4	h_2	h_5	h_4	h_3	h_4	h_5	h_2	h_4
A6	h_1	h_1	h_0	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_4	h_3
B2	h_3	h_4	h_4	h_0	h_1	h_1	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5
B4	h_4	h_2	h_5	h_1	h_0	h_1	h_5	h_2	h_4	h_4	h_3	h_4
B5	h_4	h_5	h_2	h_1	h_1	h_0	h_4	h_4	h_3	h_5	h_4	h_2
C1	h_2	h_4	h_5	h_2	h_5	h_4	h_0	h_1	h_1	h_3	h_4	h_4
C3	h_4	h_3	h_4	h_5	h_2	h_4	h_1	h_0	h_1	h_4	h_2	h_5
C5	h_5	h_4	h_2	h_4	h_4	h_3	h_1	h_1	h_0	h_4	h_5	h_2
D1	h_2	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5	h_3	h_4	h_4	h_0	h_1	h_1
D4	h_5	h_2	h_4	h_4	h_3	h_4	h_4	h_2	h_5	h_1	h_0	h_1
D6	h_4	h_4	h_3	h_5	h_4	h_2	h_4	h_5	h_2	h_1	h_1	h_0

FIG. III-2 : Matrice d'interaction des systèmes de glissement pour une structure CFC, selon Franciosi, 1984. (Gerard, 2008)

2.1.4. Effet de l'orientation cristalline

Il est généralement admis que le durcissement des métaux est essentiellement dû aux interactions entre dislocations dont les systèmes de glissement sont sécants. Ceci induit un lien étroit entre le durcissement et le nombre de systèmes actifs dans le cristal. Ainsi, les monocristaux orientés pour glissement simple se caractérisent par un faible taux d'écroutissage tandis que les monocristaux [111] et [001] ont un taux d'écroutissage largement supérieur à celui des autres orientations cristallines [(Göttler, 1973), (Takeuchi, 1975)]. FIG.III-3 présente les courbes de traction obtenues sur des monocristaux de cuivre de différentes orientations cristallines. On note un effet important de l'orientation sur les courbes de tractions indépendamment de la température (Takeuchi, 1976a et 1976b).

L'étude des caractéristiques de l'écroutissage des monocristaux de cuivre a mené Takeuchi (1975) à classer ces derniers en 4 types, en fonction de la combinaison des vecteurs de glissement actifs : [001], [111], [101]-[212] et [112]. De même, Davis et al. (1957) ont mis en évidence l'effet de l'orientation sur les courbes d'écroutissage pour des monocristaux d'aluminium. Karaman et al. (2001) ont réalisé des essais de traction sur des monocristaux d'un acier austénitique inoxydable 316L pour trois orientations cristallographiques : [123], [001] et [111]. Les trois orientations se caractérisent par un stade I (glissement facile) assez rapide, bien que cette région soit plus étendue pour l'orientation [123]. Le taux d'écroutissage est faible pour le monocristal [123] comparé aux deux autres orientations, et l'activation du glissement simple induit la formation d'une structure de dislocations planaire. Des fautes d'empilement et des macles sont également observées. Quant aux monocristaux [111] et [100], le glissement multiple est détecté dès les premiers stades de la déformation plastique avec le développement d'une microstructure formée principalement de fautes d'empilement et de macles (FIG.III-4).

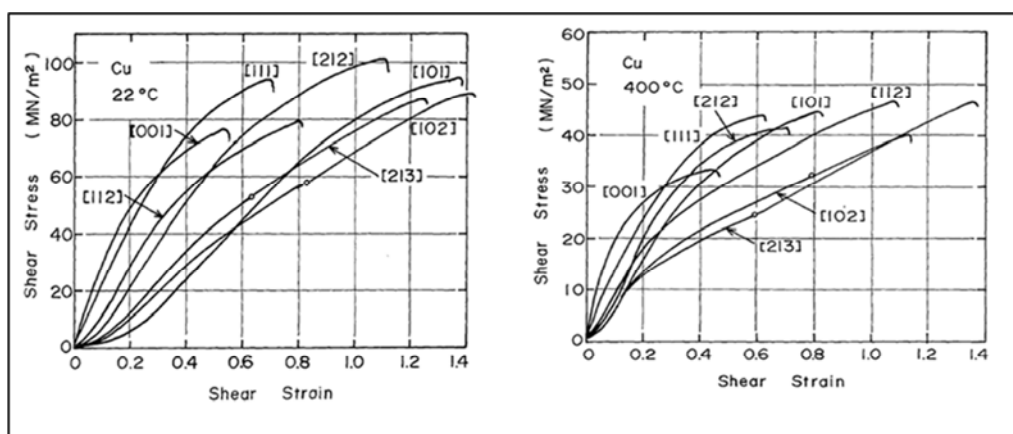


FIG. III-3 : Courbes de traction expérimentales obtenues sur des monocristaux de cuivre de différentes orientations et à deux températures, 22°C et 400°C (Takeuchi, 1975)

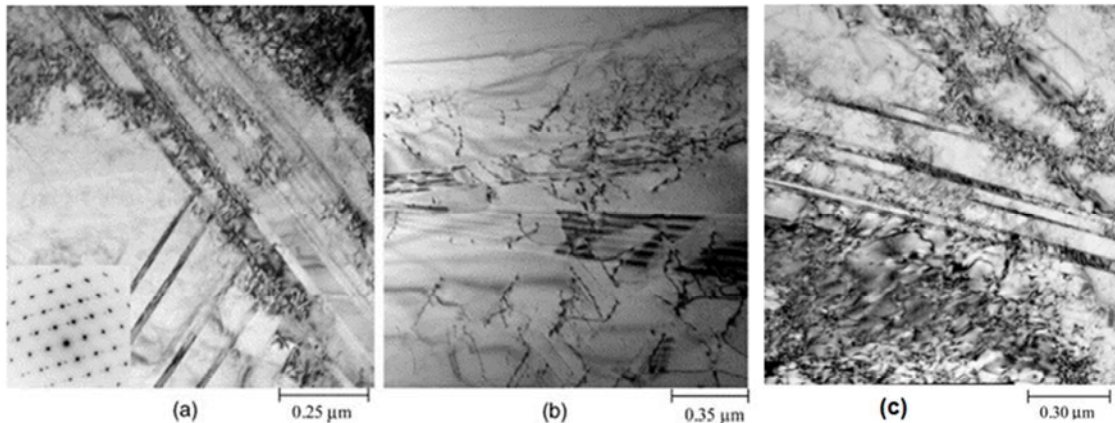


FIG. III-4: Observations MET sur des monocristaux de l'acier 316L déformés en traction à température ambiante. (a) et (b) présentent respectivement des macles et des défauts d'empilement observés dans un monocristal [111] déformé jusqu'à 3%. (c) microstructure développée dans un monocristal [123] déformé jusqu'à 25% (Karaman et al., 2001)

La dépendance du comportement en traction vis-à-vis de l'orientation cristalline ne se limite pas aux monocristaux mais concerne également les grains dans les polycristaux. En effet, de nombreux travaux, menés sur des polycristaux d'aluminium, de cuivre [(Huang and Winther, 2007), (Huang and Hansen, 1997)] et de nickel (Hansen et al., 2001), ont démontré le rôle clé des orientations des grains formant le polycristal dans la formation et l'évolution de la microstructure. Ainsi, en traction, on peut distinguer trois domaines d'orientation correspondants à trois microstructures différentes, comme le montre la figure FIG.III-5 :

- ✓ Type 1 : cette microstructure se forme dans les grains situés dans la zone centrale du triangle standard. Elle est constituée de joints géométriquement nécessaires (GNDs) droits et alignés selon un plan de glissement qui change d'une zone à l'autre.
- ✓ Type 2 : cette microstructure se développe dans des grains ayant une orientation proche de [100]. Elle se caractérise par la formation de cellules equiaxes et une faible densité de GNDs.
- ✓ Type 3 : cette microstructure caractérise les grains d'orientation proche de [111]. Elle est constituée de cellules de dislocations allongées dont les murs ne présentent pas de caractère cristallographique.

Cette corrélation entre l'orientation cristalline du grain et la structure des dislocations qui s'y développe a été démontrée expérimentalement aussi bien pour les matériaux à forte et moyenne énergie de faute d'empilement (EDE) (Al (Huang and Winther, 2007)) et Ni (Haddou, 2003)) que pour des polycristaux à plus faible EDE (Cu (Huang and Winther, 2007) et acier 316L (Gaudin, 2001)).

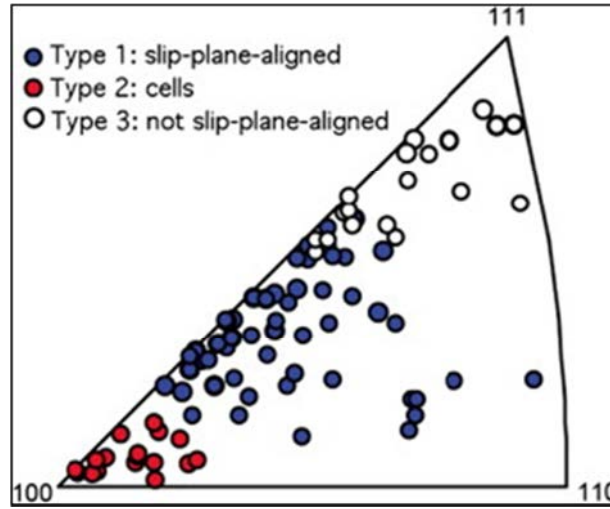


FIG. III-5: Effet de l'orientation des grains sur la microstructure formée pour un polycristal d'aluminium avec une taille de grain de 300µm, déformée jusqu'à 34% à température ambiante (Sauzay and Kubin, 2011)

2.2. Effet de la taille des grains

L'effet de la taille des grains sur les propriétés mécaniques des matériaux métalliques a fait l'objet de nombreux travaux visant à le mettre en évidence expérimentalement mais aussi à proposer des modèles capables d'expliquer son origine physique. Bien que l'écroutissage des matériaux soit généralement lié aux interactions entre dislocations, qui en se multipliant, entravent mutuellement leurs glissement, les joints de grains constituent également des obstacles au mouvement des dislocations et induisent ainsi un effet de taille sur la réponse mécanique du polycristal.

Hall (1951) et Petch (1952) furent parmi les premiers à mettre en évidence expérimentalement l'effet de la taille des grains sur la limite d'élasticité macroscopique. En effet, la limite élastique conventionnelle (à 0.2% de déformation plastique) a tendance à augmenter lorsque la taille des grains diminue. Les deux auteurs ont également proposé une loi empirique, dite loi de Hall-Petch, qui lie la limite d'élasticité σ_y au diamètre moyen des grains d :

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{K_{HP}}{\sqrt{d}} \quad (\text{III.1})$$

où σ_0 désigne la contrainte de friction des dislocations en l'absence de joints de grains (Jago et Hansen, 1986) et K_{HP} la constante de Hall-Petch qui dépend du matériau. Par la suite, les travaux de Jensen et al. (1989) ont permis d'étendre cette loi à tous les niveaux de déformation et ce jusqu'à rupture. Ainsi, la loi s'écrit :

$$\sigma_y(\varepsilon) = \sigma_0(\varepsilon) + \frac{K_{HP}(\varepsilon)}{\sqrt{d}} \quad (\text{III.2})$$

où $\sigma_y(\varepsilon)$ est la contrainte d'écoulement à la déformation ε .

La loi de Hall-Petch a été validée expérimentalement sur une large gamme de tailles de grain et pour différents matériaux purs et alliages de structure cubique à faces centrées (Cu, Al, Ni, laiton, 316L, [Hansen (1985), Jago and Hansen (1986), Thompson (1977), Wilcox and Clauer (1972)]. Ces études

montrent également que les paramètres de la loi de Hall-Petch ($\sigma_0(\epsilon)$ et $K_{HP}(\epsilon)$) dépendent du matériau, du niveau de déformation et de la gamme des tailles de grains étudiés, comme le montre la FIG.III-6.

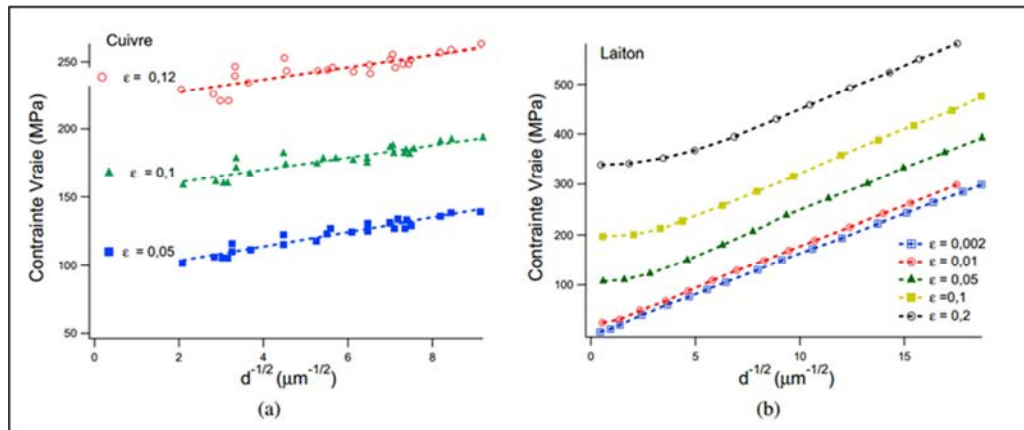


FIG. III-6: Effet de la taille de grain sur la contrainte d'écoulement pour différents niveaux de déformation (a) dans le cuivre (b) dans le laiton (Thompson, 1977)

Haddou (2003) explique l'évolution des paramètres de la loi Hall-Petch avec la déformation par des changements des mécanismes de déformation dans le matériau. En effet, l'effet de la taille de grain sur la contrainte d'écoulement serait associé essentiellement aux interactions à longue distances (Haddou, 2003). Ainsi, au stade I, le glissement simple est prédominant et aucune structure de dislocation n'est formée. La valeur de $K_{HP}(\epsilon)$ est alors plus élevée à ce stade et augmente avec la contrainte intergranulaire. Les stades II et III se caractérisent par la formation des structures de dislocations, favorisée par l'activation du glissement secondaire et du glissement dévié. Les incompatibilités intergranulaires sont alors réduites du fait des nombreux murs de dislocations à travers le grain et la contrainte est moins sensible à la taille de grains. Ceci se traduit par une baisse de la valeur de $K_{HP}(\epsilon)$.

Quant à la contrainte de friction $\sigma_0(\epsilon)$, sa faible valeur au début de la déformation est liée à l'absence de structures de dislocation et à la faible intensité de l'auto-écrouissage. La généralisation de la déformation plastique et la multiplicité du glissement induisent un écrouissage latent important entraînant de fortes valeurs de $\sigma_0(\epsilon)$ aux stades II et III.

Bien qu'elle soit empirique, la loi Hall-Petch a été expérimentalement validée sur de nombreux matériaux et ce pour une large gamme de tailles de grains, du millimètre jusqu'à la centaine de nanomètres. Par suite, des modèles ont été proposés dans le but d'expliquer physiquement l'effet de la taille des grains. Le modèle le plus connu est celui de l'empilement des dislocations aux joints des grains (Eshelby et al., 1951). Ce modèle considère l'effet de l'empilement de dislocations sur un joint de grains induit par l'activation d'une source Frank-Read placée au milieu du grain, comme le montre la FIG.III-7. Cet empilement conduit à une concentration des contraintes au niveau du joint de grains et on suppose que la limite élastique du polycristal est atteinte lorsque le champ des contraintes relatif à l'empilement induit une déformation plastique dans les grains adjacents. Un calcul basé sur l'équilibre des forces s'appliquant sur chaque dislocation de l'empilement montre que le champ de contrainte créé par l'empilement sur le joint dépend de la longueur de l'empilement, qui dans le cas

limite, serait égal à la moitié du diamètre du grain (pour chacun des empilements de signes opposés), d'où la justification de la dépendance de la limite d'élasticité à la taille de grain. Cette justification est toutefois mise en défaut car les empilements sont rarement observés même pour des polycristaux présentant un effet Hall-Petch (Aldazabal and Sevillano, 2004). De plus, Li et Chou (1970) ont observé la nucléation des dislocations aux joints de grains en l'absence d'empilements.

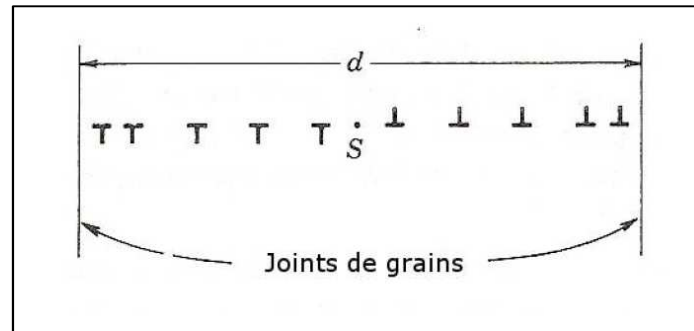


FIG. III-7 : Empilements de dislocations émises par une source Frank-Read (Hirth and Lothe, 1992)

D'autres modèles, ne faisant pas appel aux empilements, ont également été proposés. Le principe de ces approches est de lier l'augmentation des contraintes internes à une densité de dislocation additionnelle induite par la présence des joints de grains. Ce surplus des dislocations peut être dû au stockage des dislocations à proximité des joints de grains au cours de la déformation plastique, à la présence de sources de dislocations au niveau des joints de grains ou encore à l'accommodation des hétérogénéités de déformation inter-granulaires, comme le montre la FIG.III-8.

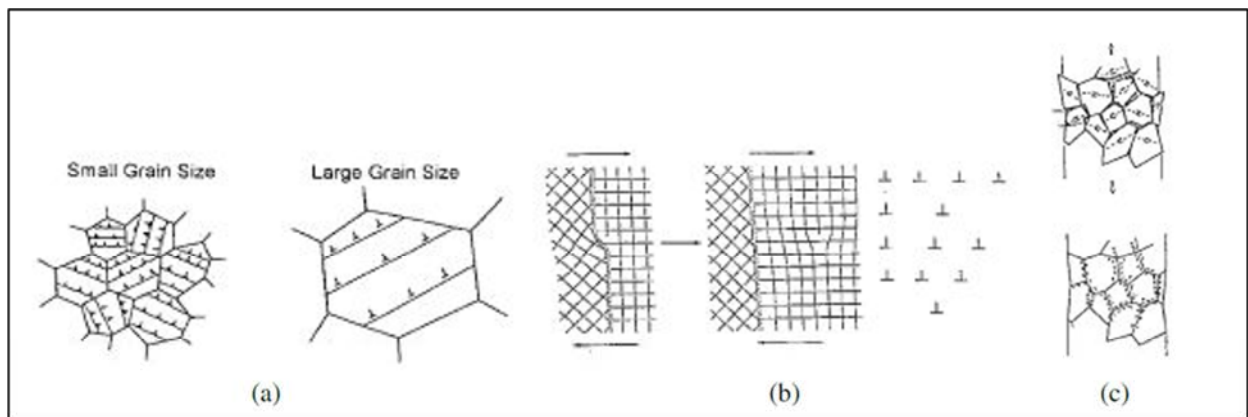


FIG. III-8: Mécanismes d'augmentation de la densité totale de dislocations dues à la présence des joints de grains (a) diminution du libre parcours moyen pour un niveau de déformation donné (b) sources de dislocations (c) accommodation des hétérogénéités de déformation inter-granulaires. (Conrad and Jung, 2005)

Le modèle d'accommodation a été proposé par Ashby (1970). Comme le montre la FIG.III-8c, des désorientations entre grains se développent au cours de la déformation plastique. Le modèle suppose donc que la cohésion du matériau est assurée par l'introduction sur le joint de grain des parois de dislocations de même signe afin d'accommoder les désorientations ou la différence de glissements entre grains. Ces dislocations sont appelées dislocations géométriquement nécessaires (DGNs).

3. Formulation du modèle

Dans cette partie, un modèle de plasticité cristalline basé sur les densités de dislocations est présenté. L'objectif étant dans un premier temps de pouvoir simuler le comportement en traction de monocristaux et de polycristaux de structure cubique à face centrée.

La densité de dislocation est utilisée comme variable interne et les mécanismes de plasticité sont décrits grâce à des processus de multiplication, d'annihilation et d'ancrage des dislocations. La distinction entre différentes familles de dislocations permet la clarification et l'identification du rôle de chacun dans les mécanismes mis en jeu lors de la déformation plastique. Les lois et les différents paramètres du modèle trouvent alors leur sens physique et le nombre de paramètres ajustables est largement limité.

L'objectif de cette étape étant la validation des lois de plasticité cristalline basées sur les densités de dislocations, nous nous limitons aux chargements monotones à température ambiante. Le modèle sera ensuite enrichi afin d'être étendu à des chargements plus complexes à haute température (Chapitres IV et V)

Les lois d'évolution du modèle ont été implémentées dans le logiciel SiDoLo sous forme de sousroutines écrites en Fortran. Les calculs ont été réalisés sur des monocristaux et des polycristaux de structure cubique à faces centrées (CFC)

3.1. Lois d'évolution des différentes populations de dislocations

Une des étapes clés de l'élaboration du modèle a été de définir les variables internes et leurs lois d'évolution. Dans notre approche, trois familles de dislocations sont considérées : les dislocations vis ρ_s , les dislocations coins ρ_e et les dislocations dipolaires ρ_d [(Differt and Essmann, 1993), (Essmann and Differt, 1996)]. Les lois d'évolutions des densités de dislocations de chaque population sont associées à des mécanismes physiques observées en MET ou en MET in situ. Les mécanismes retenus sont :

- ✓ Multiplication des dislocations coins et vis
- ✓ Annihilation des dislocations coins et vis
- ✓ Formation des dipôles
- ✓ Annihilation des dipôles

Les mécanismes de multiplication et d'annihilation évoqués dans cette partie sont uniquement ceux observés à température ambiante. Les mécanismes de restauration et d'interaction entre dislocations et atomes de solutés (vieillessement dynamique) seront introduits pour des températures plus élevées et discutés dans le chapitre IV.

3.1.1. Mécanismes de production des dislocations coins/vis

Dans notre modèle, la multiplication des dislocations vis et coin se fait par un processus de « Bowing-out », sous l'effet de la contrainte, des dislocations mobiles ancrées dans un réseau de défauts supposés fixes. Afin de simplifier notre démarche, Les boucles de dislocations générées par des moulins de Frank-Read (Frank, 1980) sont modélisées par des boucles carrées ou rectangles, constituées de deux segments coins purs et deux segments coins purs comme le montre la FIG.III-9. Les segments coins se caractérisent par un vecteur de Bürgers perpendiculaire à la direction de la ligne de dislocation, tandis que les segments vis présentent un vecteur de Bürgers parallèle à la ligne de dislocation. Selon cette approche, le glissement du segment coin (vis) induira une augmentation de la longueur du segment vis (coin) et vice versa.

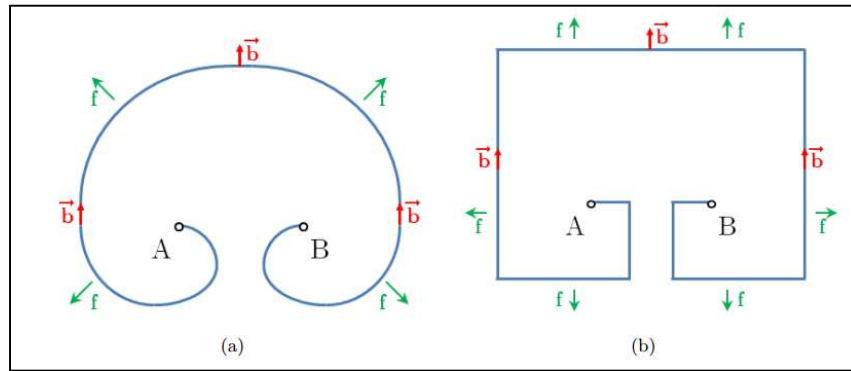


FIG. III-9: schéma présentant (a) une boucle typique de Frank-Read (b) la boucle modélisée avec des segments coins et vis purs (Giordana et al., 2012)

En considérant le schéma de la figure FIG.III-9(b), le glissement d'un segment droit vis de la boucle induira une augmentation de la longueur des deux segments coins et donc de la densité des dislocations coins. Lors de son mouvement, le segment vis balaye une aire rectangulaire $dA = L * v * dt$, L étant le diamètre de la boucle et v la vitesse de glissement du segment vis. L'incrément de la longueur des segments coin s'exprime alors par la formule : $dl = 2 * v * dt$. Par conséquent, l'incrément de la densité des parties coins de la boucle s'exprime par :

$$d\rho_e^i = \frac{dl}{V} = \frac{2*v*dt}{V}$$

V étant le volume considéré, son expression est donnée grâce à l'expression du taux du glissement plastique du segment vis sur le système i , $d\gamma_{p,s}^i = \frac{b*dA}{V}$, b étant le vecteur de Bürgers.

L'incrément de densité de dislocations coin est alors donné par :

$$d\rho_e^i = \frac{2}{bL} d\gamma_{p,s}^i$$

En suivant le même raisonnement, l'incrément de densité des dislocations vis s'exprime par la formule :

$$d\rho_s^i = \frac{2}{bL} d\gamma_{p,e}^i$$

Avec $d\gamma_{p,e}^i$ est l'incrément du glissement plastique du segment coin sur le système de glissement i.

On suppose que la taille moyenne des boucles de dislocations est égale au libre parcours moyen des dislocations. La distance L_f représente le libre parcours moyen des dislocations. Il correspond à la distance moyenne parcourue par la dislocation avant d'être stoppée par ses interactions avec d'autres dislocations (arbres de la forêt). La formule la plus communément utilisée de L_f lie le libre parcours moyen à la densité totale des dislocations via un paramètre k, qui représente le nombre de jonctions attractives (Gaudin, 2002), comme suit :

$$L_f = \frac{K}{\sqrt{\rho_t}} \quad (\text{III.3})$$

Des expressions plus élaborées du libre parcours moyens ont été proposés, principalement grâce à l'étude par Dynamique des Dislocations des différents mécanismes de stockage (Devincre et al., 2008 ; Kubin et al., 2008). Ainsi, le libre parcours moyen serait la somme de trois contributions différentes : la contribution des trois jonctions (Hirth, Lomer et glissile), les auto-interactions des dislocations du même système et finalement l'influence des systèmes coplanaire.

Dans notre cas, la formule (III.3) a été utilisée, avec une identification améliorée du paramètre K en prenant en compte l'effet de l'orientation cristalline et en se référant aux données de la Dynamique des Dislocations (Devincre et al., 2008, Kubin et al. 2008a).

Enfin dans le cas des polycristaux, l'effet de la taille des grains est également introduit dans le modèle, d'une manière relativement simple. Afin de simplifier notre approche, on suppose qu'aux premiers stades de la déformation, le libre parcours moyen des dislocations mobiles est important étant donné la faible densité des dislocations formant la « forêt ». Dans cette situation, le libre parcours moyen peut être approximé par le diamètre du grain. Au fur et à mesure que la déformation plastique augmente, la densité des arbres de la forêt augmente également constituant des obstacles plus efficaces que les joints de grain et réduisant ainsi le libre parcours moyen des dislocations mobiles. Ainsi le libre parcours moyens des dislocations vis et coins s'exprime de manière simplifiée comme suit :

$$L_f = \min(d, \frac{K}{\sqrt{\rho_t}}) \quad (\text{III.4})$$

3.1.2. Mécanismes d'annihilation des dislocations coins/vis

Le mécanisme d'annihilation est supposé le même pour les dislocations coins et vis. Il correspond à l'annihilation de deux dislocations parallèles, de même caractère mais de vecteurs de Burgers de signes opposés. L'annihilation se produit spontanément si la distance séparant les plans des deux dislocations est inférieure à une certaine distance critique (y_e pour les dislocations coins et y_s pour les dislocations vis (Essmann and Mughrabi, 1979).

Si on considère une dislocation coin de signe positif et parcourant une distance $v^+ * dt$, elle sera annihilée par une autre dislocation parallèle, du même caractère mais de signe négatif (vitesse v^-) si les deux dislocations se rencontrent dans une aire égale à :

$$dA = 2 * y_e * (v^+ + v^-) * dt \quad (\text{Essmann and Differt 1996})$$

Ainsi, la variation de la densité des dislocations coins de signe positif dans cette région pendant dt est donnée par :

$d\rho_e^+ = \rho_e^+ * (dA * \rho_e^-)$, ρ_e^+ étant la densité des dislocations coins de signe positif et ρ_e^- la densité des dislocations coins de signe négatif.

En supposant qu'il y a autant de dislocations de signe positif et négatif, on obtient alors :

$$\rho_e^+ = \rho_e^- = \frac{\rho_e}{2}, \rho_e \text{ étant la densité totale des dislocations coins.}$$

Les deux dislocations glissent sur le même système de glissement et sont supposées soumises à des forces opposées, on a $v^+ = v^-$. Ainsi, la variation totale de la densité des dislocations coins est donné par :

$$d\rho_e = d\rho_e^+ + d\rho_e^- = 2 * d\rho_e^+$$

En utilisant la loi d'Orowan on obtient l'incrément de la densité des dislocations coin disparues :

$$d\rho_e^i = 2 \frac{y_e}{b} \rho_e^i d\gamma_{p,e}^i \quad (\text{III.5})$$

De manière similaire, l'incrément de la densité des dislocations vis spontanément annihilées s'exprime sous la forme :

$$d\rho_s^i = 2 \frac{y_s}{b} \rho_s^i d\gamma_{p,s}^i \quad (\text{III.6})$$

3.1.3. Mécanismes de production et annihilation des dipôles

Comme il a été discuté dans la partie bibliographique et dans le premier chapitre de ce manuscrit, les configurations dipolaires sont fréquemment observées en MET dans les métaux et alliages CFC, plus particulièrement lors de sollicitations cycliques mais aussi en traction monotone. Un dipôle coin résulte de la rencontre de deux dislocations coins, de signes opposés et glissant sur deux plans parallèles séparés d'une distance comprise entre la hauteur maximale (h_{max}) et la distance critique d'annihilation y_e . Si la hauteur du dipôle h est inférieure à y_e , les deux dislocations s'annihilent spontanément. Inversement, si h est supérieure à h_{max} , le dipôle devient instable et les deux dislocations se séparent (voir FIG.III-10).

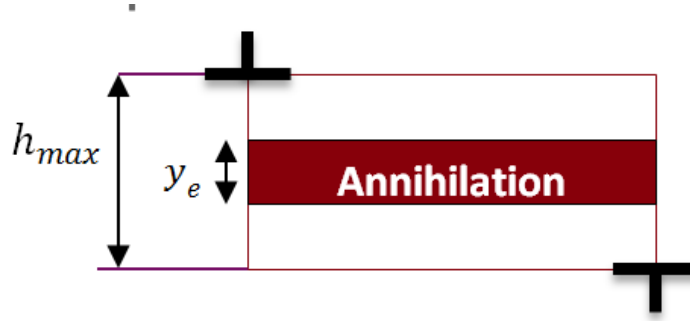


FIG. III-10: schéma de formation d'un dipôle

La valeur maximale de la hauteur du dipôle correspond à la distance critique pour laquelle la composante athermique (effective) de la contrainte appliquée est équilibrée par les interactions élastiques entre les deux dislocations coins formant le dipôle de hauteur h_{max} (FIG.III-10). La hauteur maximale s'exprime donc comme suit :

$$h_{max} = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\tau_{eff}}$$

μ est le module de cisaillement, b le module du vecteur de Burgers, ν le coefficient de Poisson et τ_{eff} la contrainte effective.

Dans cette approche, on se réfère au modèle de dislocations proposé par Differt et Essmann (1993) dans le cas des chargements cycliques. Ce modèle distingue trois populations de dislocations coins : les dislocations mobiles (ρ_1) se déplaçant suivant le vecteur de Burgers avec une vitesse v , les dislocations mobiles (ρ_2) se déplaçant dans le sens inverse avec une vitesse ($-v$) et enfin les dipôles (ρ_d), supposés immobiles. L'équation bilan des dipôles est donnée par :

$$\dot{\rho}_d = 8\rho_1\rho_2v(h_{max} - y_e) - 2y_e\rho_dv(\rho_1 + \rho_2) \quad (III.7)$$

Le premier terme de l'équation III.7 représente le taux de création de dipôles par rencontre des dislocations coins de signes opposés (ρ_1 et ρ_2). Seules les dislocations conduisant à la formation de dipôles sont prises en compte (distance comprise entre h_{max} et y_e).

Le second terme du bilan est négatif et correspond au taux d'annihilation des dipôles par interaction avec d'autres dislocations coins libres. En effet, comme le montre le schéma (FIG.III-11), une dislocation coin mobile peut s'insérer dans le dipôle et se retrouver suffisamment proche d'une des deux dislocations formant le dipôle de signe opposé (distance inférieure à y_e). Ceci induira la disparition des deux dislocations en interaction et la libération d'une dislocation coin (la deuxième dislocation du dipôle située en haut à gauche de FIG.III-11).

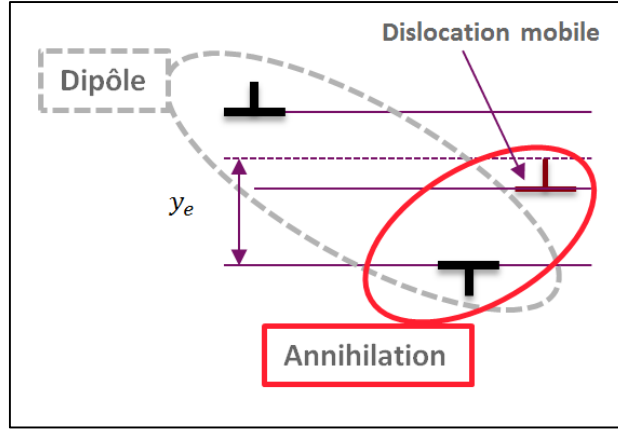


FIG. III-11: Schéma d'annihilation d'un dipôle par interaction avec une dislocation coin mobile

Nous supposons qu'il existe autant de dislocations coins de signe négatif que de signe positif et donc $\rho_1 = \rho_2 = \frac{\rho_e}{2}$.

En utilisant la loi d'Orowan

$$\dot{\gamma}_{p,e}^i = \rho_e^i * b * v \quad (\text{III.8})$$

on obtient :

$$\dot{\rho}_d^i = 2\rho_e^i \frac{h_{max}-y_e}{b} \dot{\gamma}_{p,e}^i - 2\rho_d^i \frac{y_e}{b} \dot{\gamma}_{p,e}^i \quad (\text{III.9})$$

3.1.4. Bilan des lois d'évolution des densités de dislocations

Le but de cette partie est de récapituler l'ensemble des lois d'évolution des densités de dislocations correspondant aux trois populations considérées dans ce modèle.

➤ Evolution des densités de dislocations coin

L'équation bilan des densités de dislocations coin contient trois termes : un terme de multiplication, un terme d'annihilation et un troisième terme concerne le taux de variation de la densité des dipôles dont la création se fait au détriment des dislocations coins libres.

$$\dot{\rho}_e^i = \underbrace{\frac{2}{bL_f} \dot{\gamma}_{p,s}^i}_{\text{multiplication}} - \underbrace{2 \frac{y_e}{b} \rho_e^i |\dot{\gamma}_{p,e}^i|}_{\text{annihilation}} - \underbrace{\dot{\rho}_d^i}_{\text{dipôles}} \quad (\text{III.10})$$

➤ Evolutions de la densité des dislocations vis

L'équation bilan de la densité des dislocations vis contient quant à elle deux termes : un terme de production et un terme d'annihilation.

$$\dot{\rho}_s^i = \underbrace{\frac{2}{bL_f} \dot{\gamma}_{p,e}^i}_{\text{multiplication}} - \underbrace{2 \frac{y_s}{b} \rho_s^i |\dot{\gamma}_{p,s}^i|}_{\text{annihilation}} \quad (\text{III.11})$$

➤ Evolutions de la densité des dipôles

Enfin, l'équation bilan de la densité des dipôles prend la forme :

$$\dot{\rho}_d^i = \underbrace{2 \rho_e^i \frac{h_{max} - y_e}{b} \dot{\gamma}_{p,e}^i}_{\text{multiplication}} - \underbrace{2 \rho_d^i \frac{y_e}{b} \dot{\gamma}_{p,e}^i}_{\text{annihilation}} \quad (\text{III.12})$$

Il faut noter que les équations (III.10) et (III.11) ont des termes croisés coins-vis et ne peuvent être considérées indépendamment. Ce couplage n'est habituellement pas considéré dans les modèles de plasticité cristalline. Néanmoins, il est nécessaire de le prendre en compte vu le mécanisme de création (FIG.III-9) et la différence entre les deux distances critiques y_e et y_s ($\frac{y_s}{y_e} \approx 50$).

3.2. Loi d'écoulement

Au cours de la déformation plastique, le mouvement des dislocations est souvent gêné par la présence d'obstacles. Ces derniers se classent habituellement en deux catégories :

- Obstacles induisant un champ de contrainte à longue distance (contrainte cinématique τ_μ^i). Ce champ de contrainte est athermique à cause de sa longueur d'onde spatiale très importante.
- Obstacles localisés induisant un champ de contrainte à courte distance (contrainte isotrope ou effective τ_{eff}^i). Les dislocations de la forêt et les atomes de solutés en font partie. Le franchissement de ces obstacles peut être favorisé par l'agitation thermique, on parle alors d'activation thermique.

La loi d'écoulement traduit la corrélation entre le taux de glissement plastique sur un système i donné $\dot{\gamma}_p^i$ et la composante thermique de la contrainte d'écoulement τ_{eff}^i (souvent notée τ^*).

La loi d'Orowan permet de lier le taux de glissement plastique $\dot{\gamma}_p^i$ à la vitesse moyenne v des dislocations mobiles sur le système de glissement i (équation III.8). Dans le formalisme de l'activation thermique, la mobilité des dislocations, et donc leur vitesse moyenne, est liée à la fréquence de franchissement des obstacles.

Considérons le cas d'une dislocation épinglée dans un réseau d'obstacles localisés, comme schématisé sur la FIG.III-12(a). Le franchissement de l'obstacle central permet à la dislocation de balayer une aire A pendant une durée Δt avant d'être ancrée à nouveau par un autre obstacle. La durée Δt est la somme d'un temps d'attente t_w , nécessaire pour franchir l'obstacle, et d'un temps de

vol t_f correspondant au temps nécessaire pour parcourir la distance entre deux obstacles par la dislocation.

Le temps de vol est souvent considéré comme négligeable devant le temps d'attente [(Caillard and Martin 2003), (François et al., 1991)] et donc $\Delta t = t_w + t_f \approx t_w$.

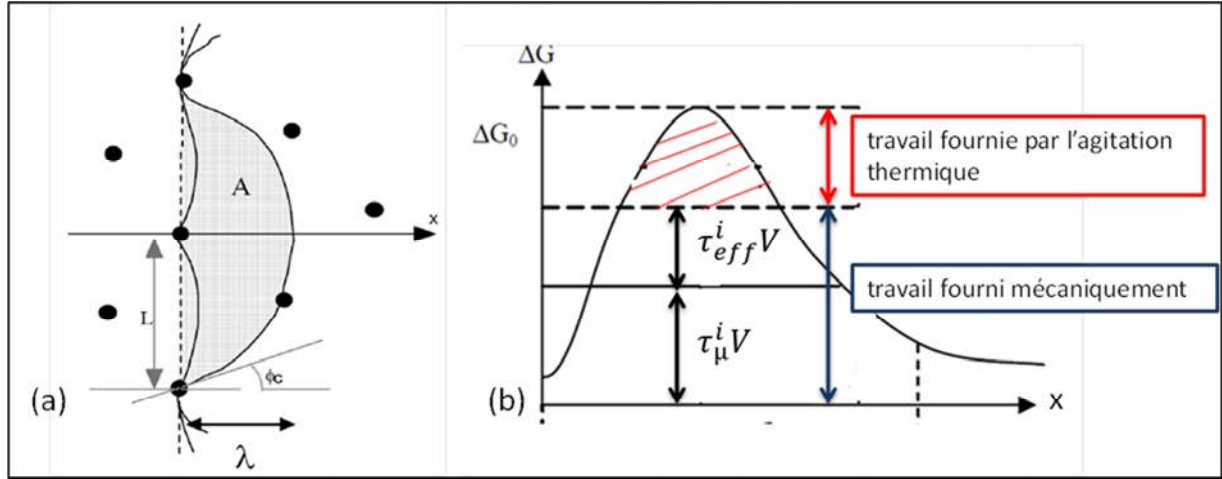


FIG. III-12: (a) Schéma de franchissement d'obstacles ponctuels (b) diagramme de décomposition de l'énergie libre de Gibbs correspondant au franchissement de l'obstacle.

La vitesse moyenne s'exprime alors comme suit :

$$v = \frac{A}{L \Delta t} \approx \frac{A}{L} \frac{1}{t_w} \approx \frac{A}{L} f \quad (\text{III.13})$$

f étant la fréquence des sauts pour franchir l'obstacle

La théorie de l'activation thermique représente l'obstacle par une barrière de potentiel dont la hauteur est caractérisée par une énergie libre de Gibbs $\Delta G = \Delta G_0 - \tau_{eff} bA$, ΔG_0 l'énergie pour franchir l'obstacle à 0°K (FIG.III-12b).

Dans le cas où le mouvement de retour de la dislocation est probable, la fréquence de sauts sera égale à la différence entre les fréquences du mouvement en avant f^+ et du mouvement de retour f^- ([François, Pineau, Zaoui, 1991], [Caillard et Martin, 2003], [Poirier, 1976]), soit :

$$f^+ = \nu_D \frac{b}{L} \exp - \frac{\Delta G_0 - \tau_{eff} bA}{kT} \quad (\text{III.14})$$

$$f^- = \nu_D \frac{b}{L} \exp - \frac{\Delta G_0 + \tau_{eff} bA}{kT} \quad (\text{III.15})$$

$$f = f^+ + f^- = 2\nu_D \frac{b}{L} \exp \left(\frac{\Delta G_0}{kT} \right) \sinh \frac{\tau_{eff} bA}{kT} \quad (\text{III.16})$$

ν_D étant la fréquence de Debye, k la constante de Boltzman, T la température.

En faisant l'approximation que $\frac{A}{L} = L$ avec L est la distance moyenne entre obstacles et en posant $V = bA$, les equations (III.10, III.15 et III.16)) permettent d'obtenir ue formulation de la loi d'écoulement en se positionnant à l'échelle du système du glissement :

$$\dot{\gamma}_p^i = 2\nu_D b^2 \rho^i \exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh\frac{\tau_{eff}^i V}{kT} \quad (III.17)$$

Comme dans notre modèle, les dislocations mobiles sont divisées en deux populations coins et vis, les vitesses de glissement viscoplastiques ont été exprimées séparément pour les deux types de dislocations, on otient alors :

➤ Pour les dislocations coins :

$$\dot{\gamma}_{p,e}^i = 2\nu_D b^2 \rho_e^i \exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh\frac{\tau_{eff}^i V}{kT} \quad (III.18)$$

➤ Pour les dislocations vis :

$$\dot{\gamma}_{p,s}^i = 2\nu_D b^2 \rho_s^i \exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh\frac{\tau_{eff}^i V}{kT} \quad (III.19)$$

Le volume d'activation V est lié à l'aire balayée par la dislocation lors de son passage entre deux obstacles. Il dépend des mécanismes qui gouvernent les interactions entre la dislocation et les obstacles localisés à franchir. Ainsi, ce volume est de l'ordre de $10 b^3$ pour le franchissement d'obstacles de type vallées de Peierls, et de $100 b^3$ pour franchir des atomes de solutés. Il est à noter que deux volumes/énergies différents spéficiques aux dislocations vis d'une part et aux dislocations coin d'autre part pourraient être considérés. Toutefois, l'identification de ces nombreux paramètres serait délicate et difficile à interpréter. Dans la suite de ce travail, le couple volume/énergie d'activation est supposé identique pour les deux types de dislocations coin et vis.

3.3. Loi d'écrouissage :

Dans le présent modèle, l'écrouissage du matériau est exprimé par l'évolution de la composante isotrope athermique τ_μ de la contrainte résolue en fonction des variables internes. Dans notre cas il s'agit des densités des dislocations. En liant l'écrouissage isotrope à la tension de ligne et en étudiant l'équilibre d'un segment de dislocation ancré dans un réseau homogène de dislocations (Saada, 1960), la cission critique τ_μ s'exprime en fonction de la densité totale des dislocations grâce à la formule [(Kocks et Mecking, 2003) (Saada, 1960)] :

$$\tau_\mu = \tau_0 + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (III.20)$$

Avec τ_0 la cission critique initiale dûe à la solution solide par exemple, μ le module de cisaillement élastique et α un coefficient caractérisant la force moyenne des interactions entre dislocations. il est de l'odre de 0.35 pour les cristaux CFC en traction monotone [(Devincre et al. 2005), (Saada 1960), (Madec et al., 2002), (Sauzay and Kubin, 2011)], mais peut prendre des valeurs inférieures pour le cas des chargements cycliques (Sauzay and Kubin, 2011).

La relation III.20 a été généralisée par la suite par Franciosi (1980, 1984) de manière à introduire les effets liés aux interactions entre les systèmes de glissement. Ainsi, l'expression de la contrainte d'écoulement sur le système de glissement i est donnée par :

$$\tau_{\mu}^i = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} \quad (\text{III.21})$$

Avec h_{ij} les coefficients de la matrice d'interaction. Ils reflètent la nature de l'interaction entre le système i et le système j . Ces interactions sont présentées en détails dans 2.1.3. Dans le cas des structures CFC, le nombre des coefficients de la matrice d'écrouissage se réduit à six pour des raisons de symétrie (FIG.III-2): h_0 (auto-écrouissage), h_1 (coplanaire), h_2 (verrous de Hirth), h_3 (colinéaire), h_4 (jonctions glissiles), h_5 (verrous de Lomer).

Bien que la matrice d'interaction soit bien formalisée grâce aux travaux de Franciosi, les proportions et les valeurs de ses coefficients sont encore un sujet de débat. Les essais sur des monocristaux orientés pour glissement simple avec changement de trajet ne permettent pas de déterminer expérimentalement les valeurs de ces coefficients car cela nécessite l'évaluation des densités des dislocations des différents systèmes de glissement après chaque étape, une tâche très délicate expérimentalement (Madec, 2001). Seul un classement qualitatif du durcissement induit par les différentes interactions peut être réalisé [(Sevillano, 1993), (Franciosi 1987), (Basinski et Basinski 1979)].

En contrepartie, des simulations par Dynamique des dislocations ont apporté une évaluation quantitative de ces interactions qui sera utilisé dans l'application de notre modèle [(Fivel, 1997), (Madec, 2001), (Madec et al., 2003), (Devincre et al., 2005, 2006)].

4. Identification des paramètres

Les lois d'écoulement et d'écrouissage implémentées dans le présent modèle font appel à un certain nombre de paramètres dont la détermination n'est pas toujours évidente. Il n'existe malheureusement pas de méthode unique d'identification et la littérature fournit des valeurs différentes pour un même paramètre. Dans cette étude, aucun paramètre n'a été ajusté sur des courbes macroscopiques polycristallines. L'identification a été réalisée à l'échelle du monocristal, en se basant sur des données expérimentales disponibles dans la littérature ou sur des données de calculs par Dynamique des Dislocations. Des courbes de traction obtenues sur des monocristaux de cuivre et issues de la littérature ont été utilisées dans cette étape, le but étant d'éviter tout ajustement des paramètres cristallins par identification inverse en utilisant les courbes macroscopiques expérimentales.

Le tableau TAB.III-2 regroupe les constantes physiques du cuivre pur.

Paramètre	Symbole	Valeur
Module de cisaillement (MPa)	μ	42 000
Module du vecteur de Burgers (m)	b	2.56×10^{-10}
Fréquence de Debye (s^{-1})	ν_D	10^{13}
Constante de Boltzman $J.K^{-1}$	k	1.38×10^{-23}

TAB.III-2 : récapitulatif des constantes physiques du cuivre pur (François et al., 1991)

➤ Matrice d'écrouissage :

La matrice d'écrouissage intervient dans la loi de l'écrouissage isotrope qui définit la contrainte critique d'activation du glissement des dislocations. Dans le cadre de cette étude, faute de pouvoir quantifier expérimentalement la matrice d'écrouissage, le choix a été fait d'utiliser les valeurs obtenus par le biais de la dynamique des dislocations. Le jeu de coefficients adopté est présenté au tableau TAB.III-3 (Kubin et al., 2008b).

h_0	h_1	h_2	h_3	h_4	h_5
0.122	0.122	0.07	0.625	0.137	0.127

TAB.III-3 : valeurs des coefficients de la matrice d'interaction pour une structure CFC

➤ Cission critique initiale τ_0

Ce paramètre apparaît comme la condition initiale de la loi de l'évolution de la contrainte critique (écrouissage isotrope). Il permet de prendre en compte la friction du réseau (forces de Peierls). Les forces liées au frottement du réseau sont relativement faibles dans les structures cubiques à faces centrées et dépendent de la température, elles diminuent au fur et à mesure que la température augmente.

Comme nous nous intéressons à la température ambiante, le paramètre τ_0 a été identifié grâce aux courbes de traction expérimentales obtenues sur des monocristaux CFC, issues de la littérature. Il correspond à la limite élastique du monocristal et s'avère dépendre de l'orientation cristalline. Pour des raisons de simplicité, pour chaque matériau, la cission critique sera prise égale à la moyenne sur les orientations des valeurs expérimentales disponibles. Le TAB.III-4 résume les valeurs obtenues pour différents monocristaux CFC ainsi que les références.

Matériau	Valeur de τ_0 en MPa	références
Cuivre	2.6	(Göttler, 1973), (Livingston, 1962), (Kocks and Mecking, 2003)
316L	80	Karaman et al., 2001
Aluminium	0.8	(Davis et al., 1957), (Hordon and Averbach, 1961)
Nickel	6.3	(Haasen, 1958)

TAB.III-4 : valeurs expérimentales de τ_0 pour différents monocristaux CFC

➤ Distances d'annihilation y_e et y_s

La valeur de la distance d'annihilation dépend du type des dislocations mises en jeu. Pour les dislocations vis, l'annihilation est favorisée par le glissement dévié (cross-slip), un mécanisme largement assisté par les fortes interactions élastiques entre dislocations et la température [(Nabarro, 1986), (Essmann, 1965), (Basinski, 1964), (Sauzay and Kubin, 2011)]. De nombreuses études ont été menées sur des monocristaux CFC afin d'estimer la distance critique y_s , donnant des valeurs variant entre 10 et 100 nm [(Takeuchi, 1975), (Essmann and Mughrabi, 1979), (Essmann and Differt, 1996), (Brown, 2002), (Devincre et al., 2008), (Mughrabi and Höppel, 2010)]. Pour le cuivre, Essmann and Mughrabi (1979) ont évalué une distance critique de l'ordre de $y_s = 50$ nm, c'est la valeur choisie dans cette étude.

En considérant l'interaction entre deux dislocations vis de signes opposés et glissant sur deux plans parallèles distant de y_s , on obtient une estimation de y_s sous la forme (Sevillano, 1993) :

$$y_s = \frac{\mu b}{2\pi\tau_{int}} \sin\theta \quad (\text{III.22})$$

τ_{int} étant la contrainte d'interaction entre les deux dislocations et θ l'angle entre le plan primaire et le plan dévié. τ_{int} est souvent assimilée à τ_{III} , la contrainte seuil pour l'annihilation des dislocations vis par cross-slip. Dans le cas du cuivre à température ambiante (300K), la valeur de τ_{III} varie entre 25 et 30 MPa [(Takeuchi, 1975), (Sauzay and Kubin, 2011)] et la formule III.22 donne des valeurs de y_s à température ambiante entre 52 et 63 μm . ces valeurs sont proches des mesures expérimentales, Essmann and Mughrabi (1979) ont mesuré une valeur de y_s à 77K de l'ordre de 75 μm .

En ce qui concerne les dislocations coins, des analyses expérimentales des hauteurs des dipôles et/ou des interprétations quantitatives ont permis d'estimer la distance critique y_e pour différents matériaux CFC [Essmann and Mughrabi, 1979, Hähner et al., 1998, Kassner et al., 2000, Gaudin, 2002, Catalao et al., 2005]. Dans cette partie la valeur choisie est celle estimée par Essmann et Mughrabi (1979) pour le cuivre à température ambiante : $y_e = 1.6$ nm.

➤ Paramètres d'activation thermique V et ΔG_0

Le volume d'activation pour l'interaction avec les dislocations de la forêt est exprimé en fonction de la densité des dislocations comme suit :

$$V = \frac{bd}{\sqrt{\rho}}$$

où d est la distance à parcourir pour franchir l'obstacle. Typiquement, $d = 4b$ à température ambiante. Cette expression, proposée par Saada (1960), donne des valeurs relativement élevées du volume d'activation ($V \approx 1.6 \times 10^5 b^3$ pour une densité des dislocations $\rho = 10^{10} m^{-2}$) ce qui est en accord avec la faible activation thermique à température ambiante dans les métaux et alliages CFC (faible effet de la vitesse de déformation). Toutefois, pour des températures plus élevées, l'effet de l'agitation thermique devient plus important induisant des volumes d'activation beaucoup plus faibles.

En ce qui concerne la valeur de ΔG_0 , des mesures expérimentales sur du cuivre à température ambiante (Mecking, 1973) donnent des valeurs comprises entre $0.15 \mu b^3$ et $0.25 \mu b^3$ (ie entre 0.66ev et 1.1 ev). Kitajima et al. (2009) ont estimé une valeur de ΔG_0 de 0.936ev sur des monocristaux de cuivre également. Dans notre cas, une valeur de 1.1 ev a été choisie.

➤ Paramètre du libre parcours moyen K

Le paramètre K intervient dans l'expression du libre parcours moyen L_f (équation III.3). Pour des raisons de simplicité, ce paramètre est supposé le même pour les dislocations coins et vis. Devincré et al. (Devincre et., 2008 et Kubin et al., 2008) ont montré que le libre parcours moyen peut s'écrire comme la somme de trois termes correspondant à trois contributions différentes : les interactions de jonctions, les auto-interactions des dislocations du même système et enfin les interactions entre systèmes coplanaires. Pour simplifier notre démarche, l'équation III.3 a été utilisée, avec un seul terme et donc un seul paramètre à identifier. Ce paramètre dépend de l'orientation cristalline choisie comme le montrent les calculs de Devincré et al. (2008).

Afin de prendre en compte la dépendance du libre parcours moyen vis-à-vis de l'orientation cristalline, le paramètre K a été identifié par confrontation du modèle avec les courbes expérimentales obtenues sur des monocristaux de cuivre de différentes orientations, issues de la littérature. Quatre orientations cristallines ont été considérées : [111], [110], [100] et le cristal bien orienté (facteur de Schmid = 0.5).

Le tableau TAB.III-5 récapitule l'ensemble des paramètres fixés du modèle pour le cuivre. Ces valeurs seront utilisées afin d'identifier le paramètre du libre parcours moyen K. ρ_0 représente la densité des dislocations initiale. Des mesures expérimentales sur des monocristaux de cuivre donnent des valeurs de ρ_0 variant entre $10^8 m^{-2}$ et $10^9 m^{-2}$ (Livingston, 1962).

Paramètre	Valeur (unité)	Référence
μ	42 GPa	François et al. (1991)
b	$2.56 \times 10^{-10} \text{m}$	François et al. (1991)
ΔG_0	1.1 eV	Kitajima et al. (2009), Mecking 1973
ρ_0	10^9 m^{-2}	Livingston, 1962
$h_0, h_1, h_2, h_3, h_4, h_5$	0.122, 0.122, 0.07, 0.625, 0.137, 0.127	Kubin et al. (2008b)
y_e	1.6 nm	Essmann and Mughrabi, 1979
y_s	50 nm	Essmann and Mughrabi, 1979
τ_0	2.6 MPa	Voir TAB.III-4

TAB.III-5 : Récapitulatif des paramètres fixés pour le cuivre

Les lois du modèles ont été implémentées sous forme de sousroutines dans le logiciel SiDoLo (SiDoLo, 2000). Des calculs ont été effectués sur les différentes orientations cristallines et pour différentes valeurs de K, coefficient qui permet le calcul du libre parcours moyen et du taux de production des dislocations (équations III.10 et III.11). Des comparaisons avec les courbes experimentales ont permis de choisir les valeurs de K.

Les FIG.III-13 et FIG.III-14 représentent les courbes prédites par le modèle pour les quatres orientations étudiées. Les courbes expérimentale utilisées pour la comparaison sont également présentées. Les courbes de tractions experimentales sont issues des travaux de Göttler (1973) et de Székely et al. (2000). Les courbes d'évolution de la densité totale des dislocations ont été calculées à partir des valeurs des contraintes résolues en utilisant la relation de Taylor (équation III.20):

$$\rho_{tot} = \left(\frac{\tau - \tau_0}{\alpha \mu b} \right)^2$$

Dans cette relation, la matrice d'interaction a été remplacée par un coefficient d'interaction α dont la valeur a été prise égale à 0.35, conformément aux valeurs trouvées dans la littérature (Kubin et al., 2008b).

Le glissement plastique total est la somme sur tous les systèmes de glissement faciles du glissement plastique, ainsi pour l'orientation [100] ayant 8 systèmes de glissement facile, $\gamma_{tot}^p = \sum_{i=1}^8 |\gamma_p^i|$.

Le premier résultat de cette étape d'identification, est la dépendance de la valeur de K et donc du libre parcours moyen vis-à-vis de l'orientation cristalline. Ceci est en accord avec les résultats des calculs par Dynamique des Dislocations (Devincre et al., 2008). Deux valeurs de K ont pu être identifiées : une valeur unique de 300 pour le monocristal bien orienté et pour le [110], et une valeur inférieure, valant 30, pour les orientations [111] et [100]. Ces valeurs sont en accord avec les valeurs obtenues par Dynamique des Dislocations. En effet, Kubin et al. (2008b) estiment ces valeurs à 20.7 pour l'orientation [001] et 24.6 pour l'orientation [111]. Toutefois, la valeur de K obtenues par les mêmes auteurs pour le monocristal bien orienté (~600) est supérieure à celle identifiée au cours cette étude (300).

La valeur du paramètre K est souvent à rapprocher du nombre d'obstacles franchis par la dislocation avant de s'immobiliser. Ainsi, pour les monocristaux/grains bien orientés, le glissement simple est favorisé et l'absence du glissement multiple induit des structures de dislocations « lâches ». Les obstacles sont dans ce cas moins efficaces ce qui se traduit par de longs libres parcours moyens et donc une grande valeur de K ($L_f = \frac{K}{\sqrt{\rho}}$). Inversement, les monocristaux/grains dont l'orientation est proche de [111] et [100] se caractérisent par un glissement multiple facile et donc des obstacles de type « arbes de forêt » plus efficaces. Ceci se traduit par une faible valeur de K (libre parcours moyen court).

Cette identification est également en accord qualitatif avec les observations des microstructures des dislocations développées au cours de la déformation plastique. Comme le montre la FIG.III-5 pour un polycristal d'aluminium, les structures des dislocations développées dans les grains situés au centre du triangle standard, y compris ceux aux alentours de l'orientation [100], sont similaires ce qui laisserait penser que les mécanismes de blocage du glissement des dislocations mobiles seraient comparables dans ces grains. Ceci est aussi valable pour les orientations proches des deux sommets [111] et [110] où le glissement multiple est favorisé.

Dans la suite de cette étude, deux valeurs du paramètre K seront utilisées. Pour les monocristaux (ou grains) situés au centre du triangle standard et aux alentours de l'orientation [100], la valeur $K = 300$ leur sera assignée. Les monocristaux d'orientations proches des deux sommets [111] et [110] auront une valeur $K = 30$.

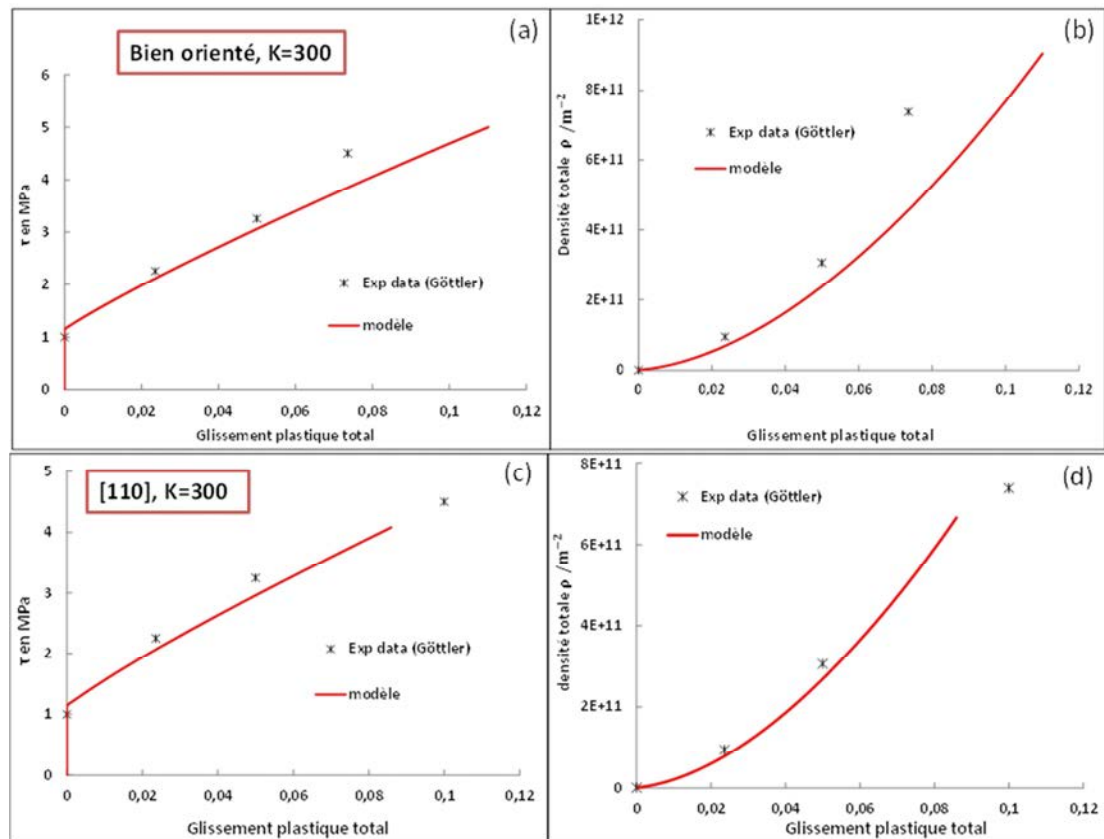


FIG. III-13: Identification du paramètre K : (a) et (b) pour le monocristal bien orienté (b) et (c) pour le monocristal [110]. (a) et (c) courbes de la cission résolue en fonction du glissement plastique total. (b) et (d) courbes de la densité totale des dislocations en fonction du glissement plastique total.

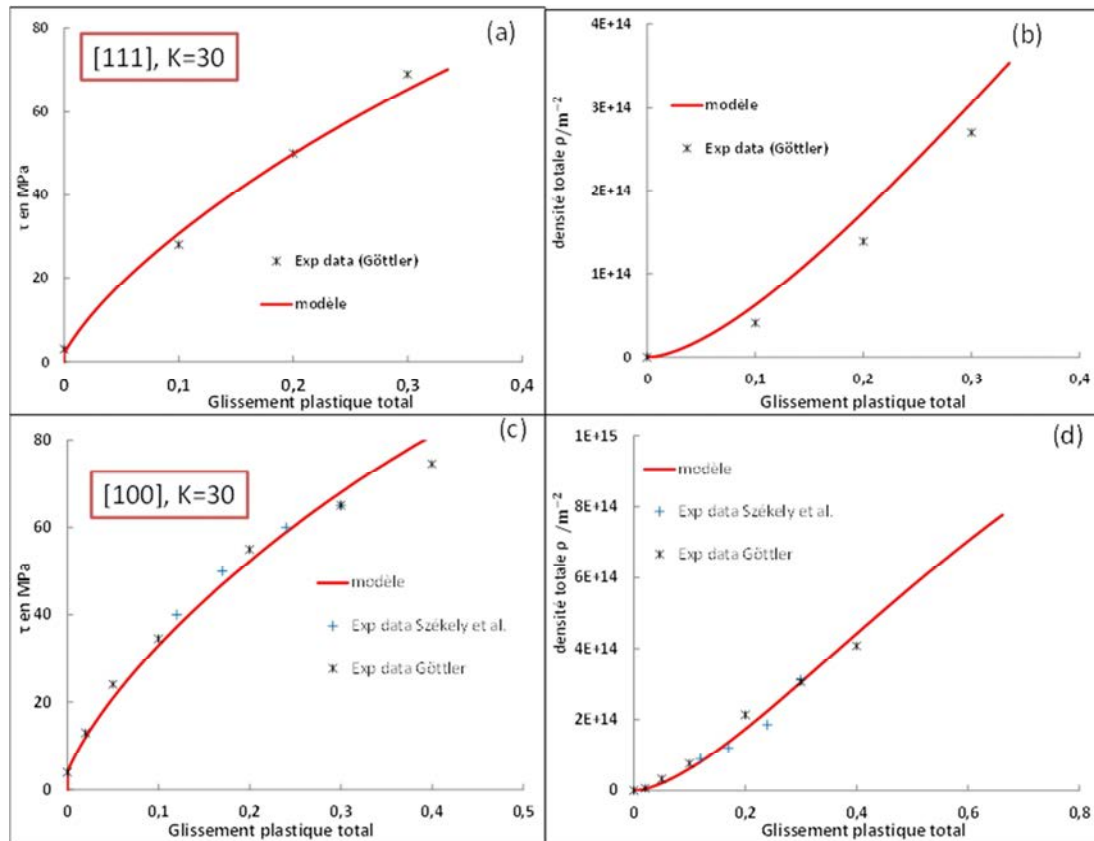


FIG. III-14: Identification du paramètre K : (a) et (b) pour le monocristal [111] (b) et (c) pour le monocristal [100]. (a) et (c) courbes de la cisssion résolue en fonction du glissement plastique total. (b) et (d) courbes de la densité totale des dislocations en fonction du glissement plastique total.

5. Critère de séparation des grains selon l'orientation cristalline

L'étape de l'identification des paramètres a permis de distinguer deux familles de monocristaux/grains. Le triangle standard est divisé en deux domaines correspondant à deux valeurs différentes du paramètre K ($K=30$ et $K=300$), comme il est schématisé dans la FIG.III-15. Cette séparation semble être en accord avec les observations expérimentales des structures des dislocations (FIG.III-5). Toutefois, une question se pose sur le critère de séparation entre les deux domaines. Le critère adopté au chapitre 2 dans le cas des chargements cycliques ne permet pas une répartition exacte dans le cas des chargements monotones. En effet, comme le montre la FIG.III-15, les grains dont les orientations sont proches de [110] se trouveraient dans le même domaine que les orientations [111] et [100] tandis que les structures des dislocations qui s'y développent en traction sont similaires à celles observées dans les monocristaux bien orientés (situés au centre du triangle standard). Notons qu'en fait la même observation peut être faite concernant les tracés sur les triangles standards du chapitre 2. Dans les grains ou cristaux $\langle 110 \rangle$ sont souvent observés des BGPs (PSBs). Le critère de partition du triangle standard utilisé dans le chapitre 2 pourrait donc être affiné.

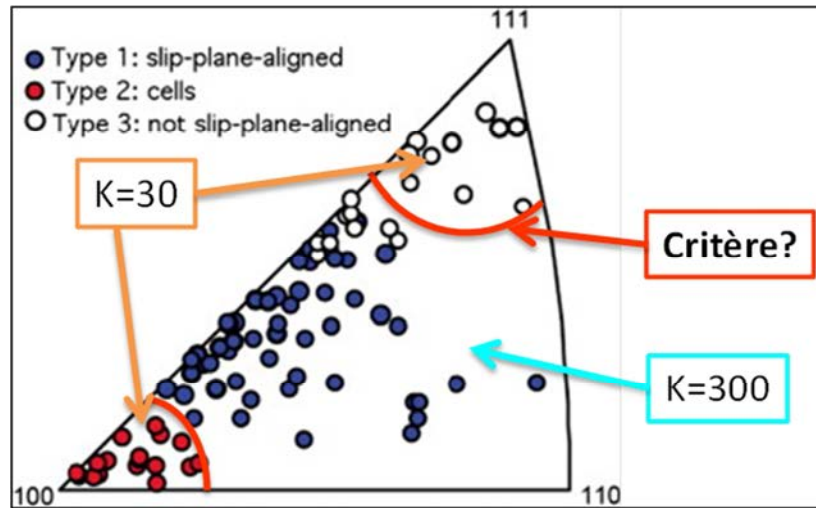


FIG. III-15 : Schéma de séparation du triangle standard en deux domaines selon la valeur de K. Voir FIG.III-5 pour des détails sur les points expérimentaux.

Dans le cadre de cette étude, le critère de répartition des orientations a été modifié en se basant sur les valeurs du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}}$ au lieu du rapport $\frac{\tau_{secondaire}}{\tau_{primaire}}$. Le schéma de la FIG.III-16 présente les iso-valeurs du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}}$ dans le triangle standard. Il varie entre 0 pour les orientations se situant au centre du triangle, y compris l'orientation [110] et 1 pour les deux autres sommets [111] et [100]. Cette répartition permet d'assigner aux monocristaux bien orientés et à ceux aux alentours de [110] le même jeu de paramètres, ce qui est en accord avec les observations expérimentales (FIG.III-5).

Une étape essentielle de cette étude a été de définir une valeur critique du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}}$ afin de définir la frontière séparant les deux domaines. Pour ce faire, on s'est appuyé sur les travaux menés par Takeuchi (1975, 1976) dans le but d'étudier l'effet de l'orientation sur les courbes d'écrouissage des monocristaux de cuivre à différentes températures. Dans notre cas, on se limite aux résultats obtenus à température ambiante. Dans ces travaux, Takeuchi a élaboré des monocristaux de cuivre en faisant varier leurs orientations aux alentours d'une orientation initiale, correspondant à un des sommets du triangle standard. Ainsi, dans (Takeuchi, 1975), l'orientation initiale est [111] et la déviation varie jusqu'à 24° en suivant l'axe [111]-[110]. Dans (Takeuchi, 1976), l'orientation initiale est [100] et la déviation varie jusqu'à 26° en suivant l'axe [100]-[110].

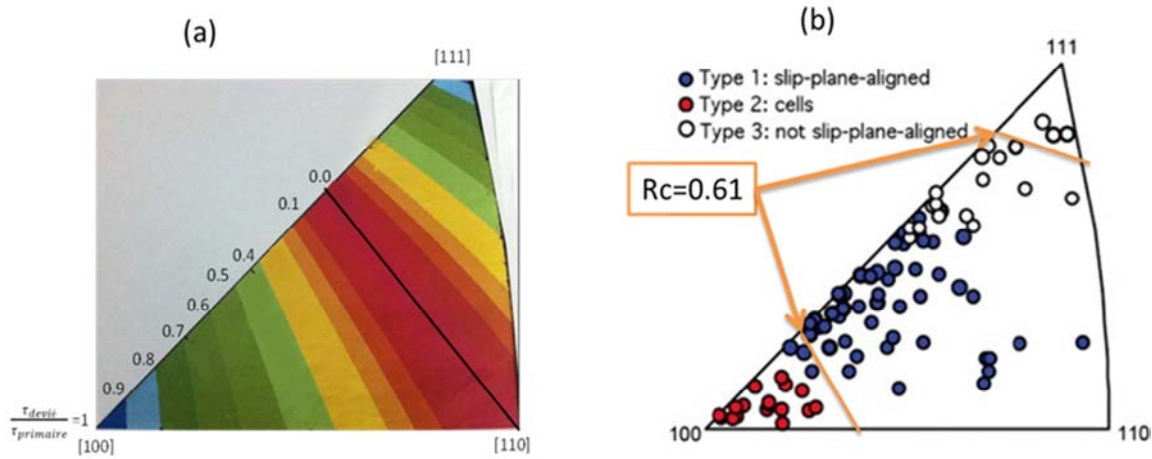


FIG. III-16: (a) Les iso-valeurs du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}}$ (Tomas Kruml, communication personnelle, 2010). (b) Répartition du triangle standard en deux domaines selon le critère $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}} = 0.61$.

La figure FIG.III-17 présente les courbes de traction expérimentales obtenues par Takeuchi pour les orientations appartenant aux deux axes [111]-[101] et [001]-[101]. On note que les courbes de traction dépendent fortement de l'orientation cristalline et ce pour les différentes températures étudiées (Takeuchi, 1975 et 1976). En partant de l'orientation [111] ([100]), le taux d'écroutissage diminue avec la déviation angulaire jusqu'à atteindre son minimum pour l'orientation [101]. Toutefois, les niveaux des contraintes maximales ainsi que la valeur maximale du taux d'écroutissage semblent se stabiliser à partir d'une certaine déviation ($\theta \approx 6^\circ$). Cette dernière valeur est alors utilisée afin de calculer la valeur critique du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}}$.

En effet, nous considérons que l'orientation correspondant à la déviation $\theta \approx 6^\circ$ est la frontière entre les deux domaines du triangle standard. Pour l'axe [111]-[101], nous trouvons une valeur du rapport $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}} = 0.61$ et pour l'axe [001]-[101] une valeur $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}} = 0.81$. Selon le schéma de la figure FIG.III-16, une valeur critique de 0.8 serait trop importante et la quasi-totalité des grains se retrouveront dans le domaine central. La valeur 0.61 semble plus raisonnable au regard des observations expérimentales (FIG.III-16). Ainsi, le critère de séparation entre les deux familles d'orientation utilisé dans cette étude est : $R_c = 0.61$.

La figure FIG.III-16 (b) présentent les deux domaines du triangle standard selon le critère $R_c = 0.61$. Le domaine $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}} > R_c$ comprend bien des grains orientés pour glissement multiple selon les données expérimentales, tandis que le domaine $\frac{\tau_{d\acute{e}vi\acute{e}}}{\tau_{primaire}} \leq R_c$ contient les monocristaux orientés pour glissement simple. Ce dernier domaine contient également des monocristaux orientés pour glissement multiple mais le critère demeure correct comparé au critère basé sur le rapport $\frac{\tau_{secondaire}}{\tau_{primaire}}$ utilisé dans le 2eme chapitre de cette étude.

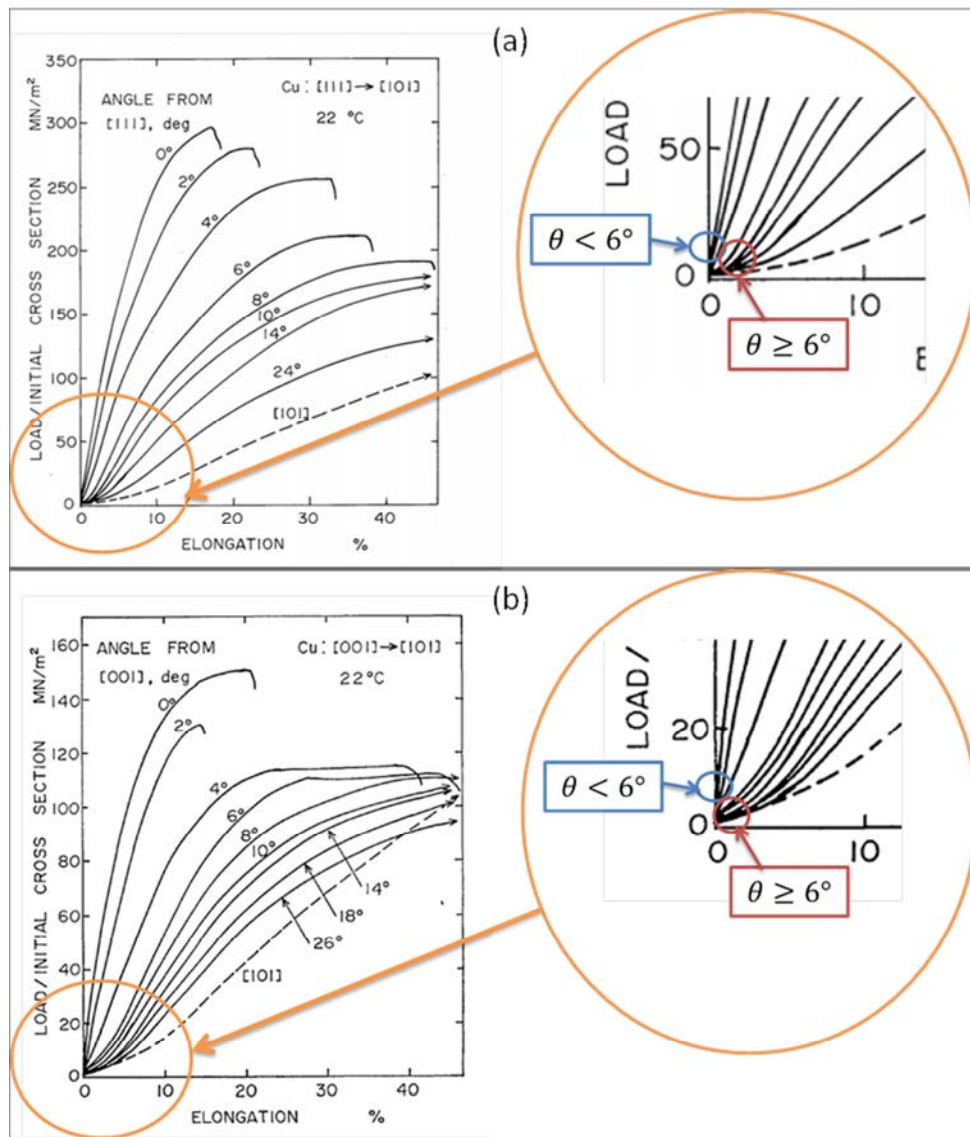


FIG. III-17: courbes de traction obtenues sur des monocristaux de cuivre à température ambiante (a) orientations sur l'axe [111]-[101] (Takeuchi, 1975) (b) orientations sur l'axe [001]-[101] (Takeuchi, 1976)

6. Résultats : prédiction des courbes monotones macroscopiques à température ambiante

L'ensemble des lois d'évolution définies auparavant a été introduit dans le logiciel de simulation SiDoLo (SiDoLo, 2000). Le passage de l'échelle monocristalline à celle du polycristal est assuré par l'utilisation des deux modèles d'homogénéisation à champ moyen présentés précédemment (Chapitre II) : le modèle thermo-élastique de Kröner et l'approche élasto-plastique incrémentale proposée par Hill (1965) et Hutchinson (1976). Différents matériaux CFC ont été étudiés avec une tentative de comparaison avec des données expérimentales disponibles dans la littérature pour différentes tailles de grain. Bien que les études expérimentales portant sur l'effet de la taille des grains sur les courbes de traction des polycristaux CFC soient nombreuses, peu d'entre elles décrivent la texture des matériaux étudiés. Ce paramètre est tout aussi important et peut biaiser les

interprétations liées à l'effet de la taille de grains s'il n'est pas écarté. D'autant plus que les traitements thermiques préalables visant à modifier la taille de grain (écrouissage et recuit) peuvent également affecter la texture. Les figures FIG.III-18, FIG.III-19 et FIG.III-20 présentent les courbes prédites par les deux modèles obtenues sur du cuivre, de l'aluminium et du 316L. Quelques points expérimentaux sont également présentés. Les données expérimentales correspondent à des matériaux sans texture.

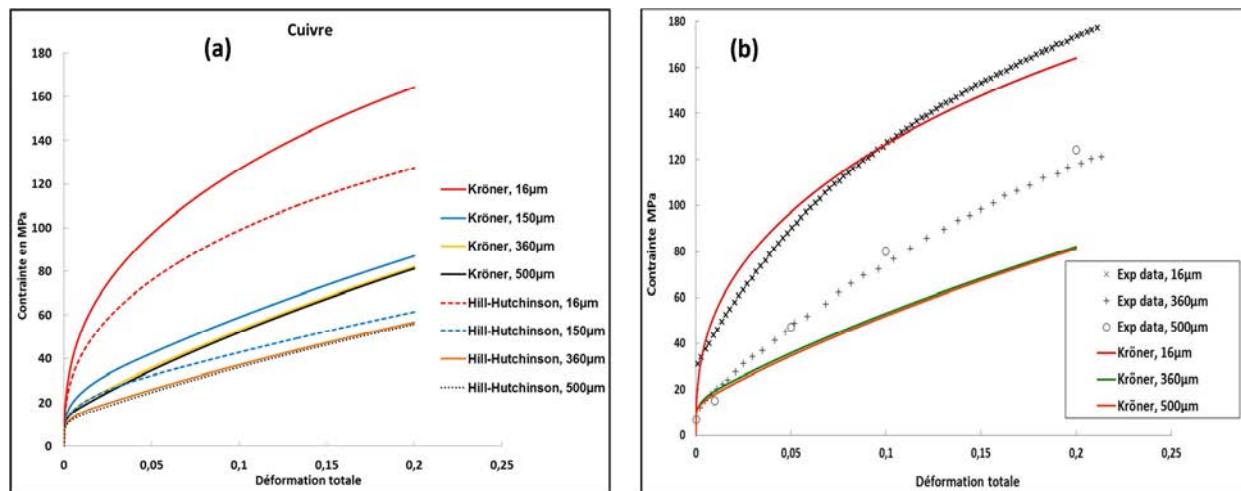


FIG. III-18: (a) comparaison entre les prédictions des deux modèles (b) comparaison entre les courbes prédites par le modèle de Kröner et des données expérimentales (Tabata et al., 1975). Cuivre à température ambiante

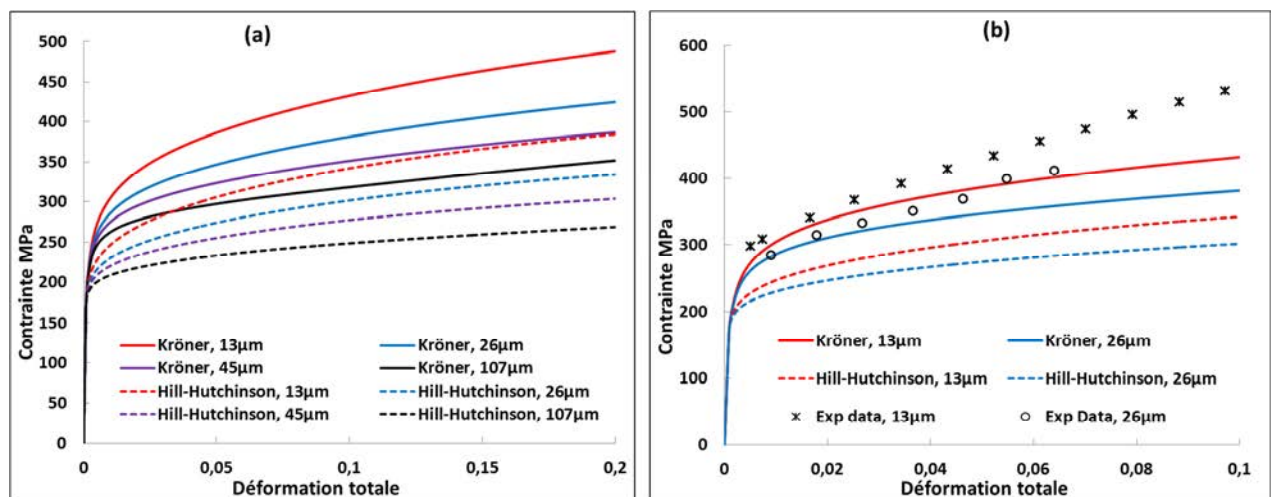


FIG. III-19: (a) comparaison entre les prédictions des deux modèles (b) comparaison entre les courbes prédites par le modèle de Kröner et des données expérimentales (Schwartz, 2011). Acier 316L à température ambiante

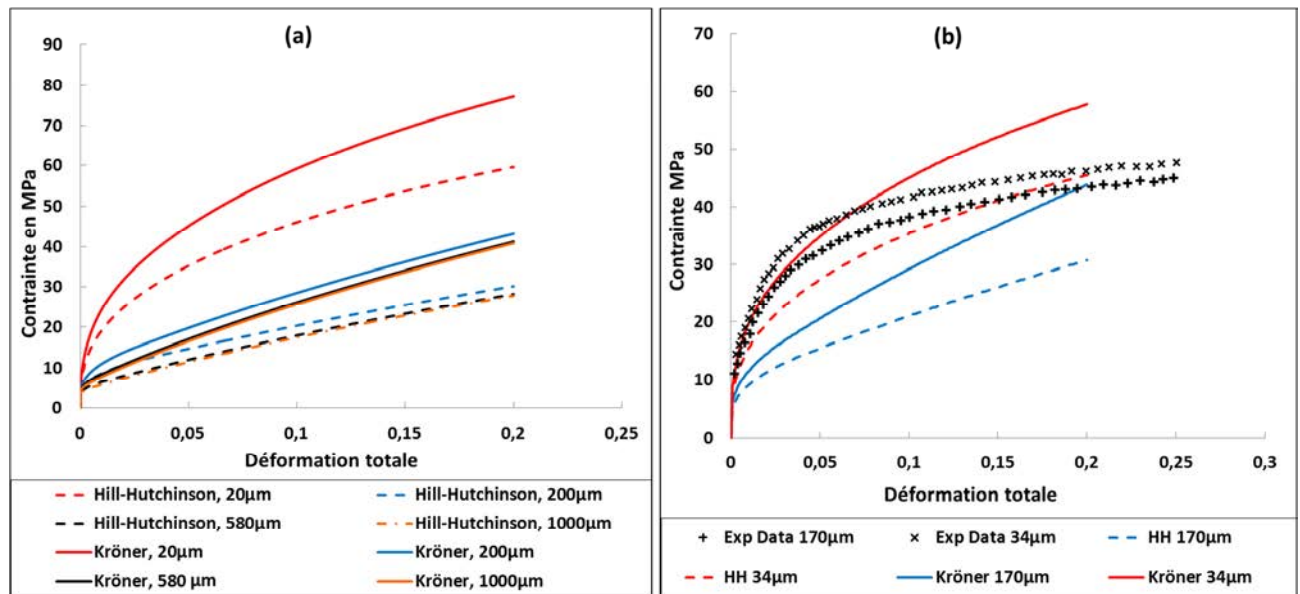


FIG. III-20: (a) comparaison entre les prédictions des deux modèles (b) comparaison entre les courbes prédites par le modèle de Kröner et des données expérimentales (Hansen, 1977). Aluminium à température ambiante

Nous notons que pour les trois matériaux, les deux modèles reproduisent un effet de la taille des grains sur les courbes de traction prédites, avec une stabilisation de cet effet à partir d'une certaine taille de grain (580 μm pour l'aluminium, 360 μm pour le cuivre). Ce résultat est en accord avec les données expérimentales qui mettent en évidence une baisse de l'effet de la taille de grains sur les niveaux des contraintes pour de larges tailles de grains (Al-Haidary et al., 1983). Comme il a été confirmé dans le cas des chargements cycliques (chapitre II), les niveaux de contraintes prédits par le modèle de Hill-Hutchinson demeurent largement en dessous de celles obtenues avec le modèle de Kröner. Ceci est dû à la nature de l'interaction entre les grains et la matrice imposée par chaque modèle. Le modèle de Kröner suppose une interaction thermo-elastique induisant de fortes incompatibilités intergranulaires, tandis que l'interaction élasto-plastique du modèle incrémental est moins forte (voir chapitre II pour plus de détails).

La comparaison avec les prédictions des deux modèles et les données expérimentales ne permet pas de conclure quant à la validité du modèle avec cette prise en compte relativement simple de l'effet de la taille de grains. En effet, pour l'acier 316L, on note un accord satisfaisant entre les courbes prédites par le modèle de Kröner et les courbes expérimentales pour les deux tailles de grain 13 μm et 26 μm, et ce jusqu'à une déformation totale de 0.04 (FIG.III-19). Pour le cuivre, le modèle fournit une approximation satisfaisante seulement pour une taille de grain de 16 μm, et sous-estime largement le niveau des contraintes pour des tailles supérieures (FIG.III-18). Cette sous-estimation est aussi notée pour l'aluminium (FIG.III-20) pour une taille de grain de 170 μm. Néanmoins, le modèle de Kröner permet une prédiction satisfaisante de la courbe de traction pour l'aluminium avec une taille de grain de 34 μm, avec une surestimation des niveaux de la contrainte pour des déformations totales supérieures à 0.1.

De façon générale, nous notons une sous-estimation des contraintes lorsque la déformation augmente. Ceci peut être expliqué en partie par la non-prise en compte des rotations du réseau cristallin dans le logiciel SiDoLo, et qui peuvent induire le glissement sur de nouveaux systèmes et

donc un écrouissage latent. De plus, le modèle de comportement cristallin tel qu'il est écrit dans SiDoLo ne décrit ni les grandes transformations ni les grands déplacements. Enfin, à forte déformation, des cellules de dislocations sont observées induisant des contraintes internes intra-granulaires [(Sauzay, 2008), (Sauzay and Kubin, 2011)]. La prise en considération de ces mécanismes permettrait fort probablement d'améliorer les prédictions.

En outre, dans la description de l'effet de la taille des grains adoptée dans cette étude, seule la taille de grain moyenne est considérée. Berbenni et al. (2007) ont mis en évidence un impact de la distribution des tailles de grains sur la limite élastique via l'utilisation d'un modèle d'homogénéisation à champs moyen combiné à une technique de « champs translatés ». Cet impact se manifeste par une diminution de la limite élastique lorsqu'il y a une dispersion des tailles de grains. Cette baisse est d'autant plus importante pour une taille de grain moyenne de l'ordre du μm .

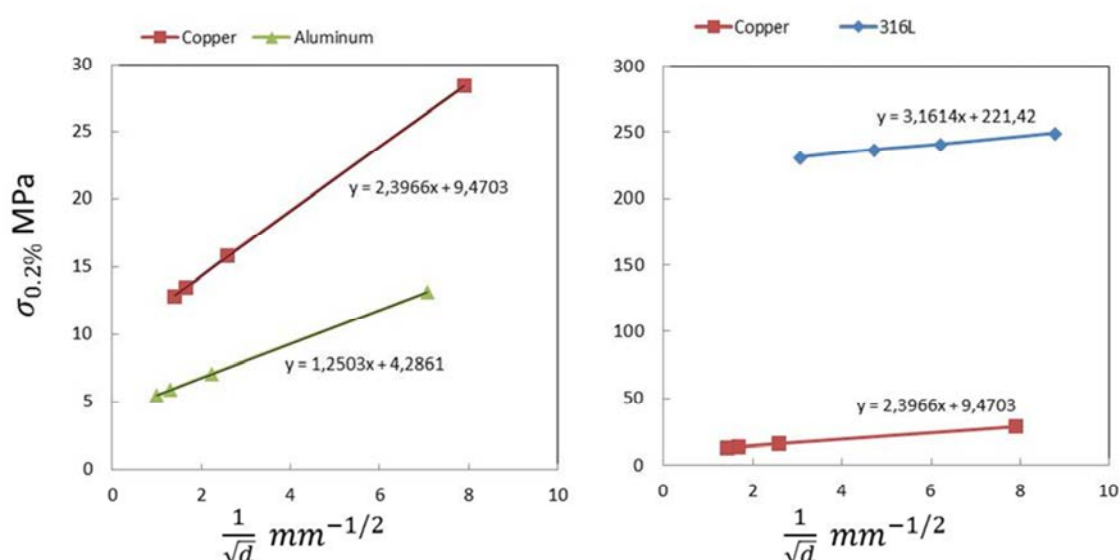


FIG. III-21 : Evolution de la limite élastique conventionnelle $\sigma_{0.2\%}$ en fonction de $1/\sqrt{d}$, d étant la taille de grain, prédite par le modèle de Kröner pour trois matériaux (Al, Cu et l'acier 316L).

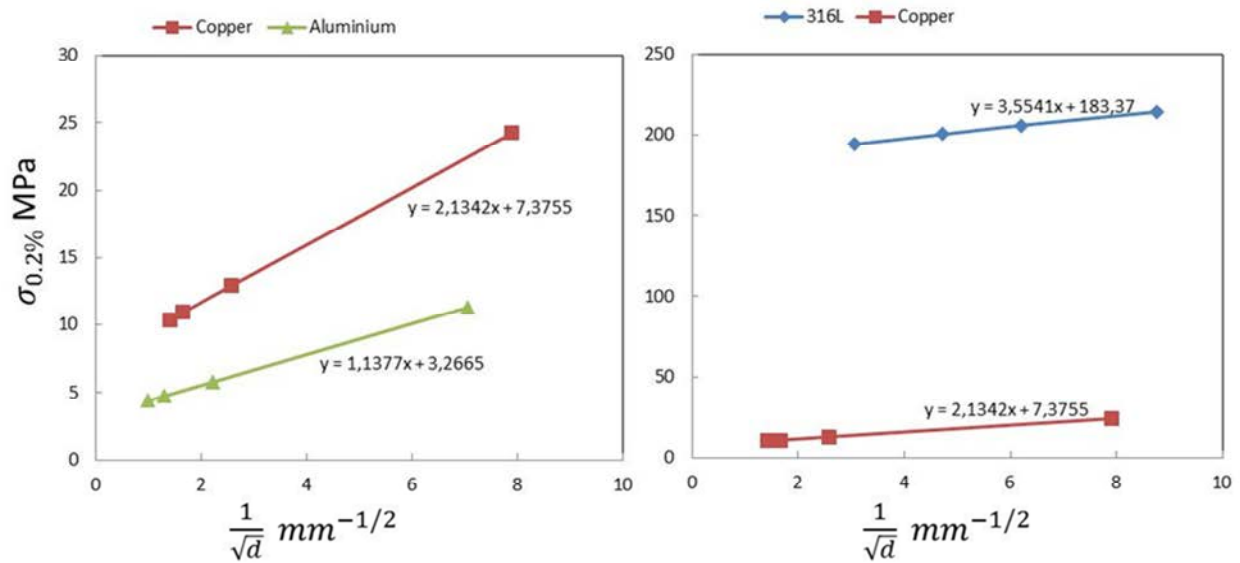


FIG. III-22: Evolution de la limite élastique conventionnelle $\sigma_{0.2\%}$ en fonction de $1/\sqrt{d}$, d étant la taille de grain, prédite par le modèle de Hill-Hutchinson pour trois matériaux (Al, Cu et l'acier 316L)

Les figures FIG.III-21 et FIG.III-22 présentent l'évolution de la limite élastique conventionnelle (à 0.2% de déformation plastique) obtenues par les modèles de Kröner et de Hill-Hutchinson, pour trois matériaux CFC (Al, Cu et 316L). Le modèle prédit bien la hausse de la limite élastique avec la réduction de la taille des grains ce qui est en accord avec les données expérimentales. On peut remarquer également que pour chaque matériau, la limite élastique prédite par le modèle de Kröner suit une loi de type Hall-Petch :

$$\sigma_{0.2\%} = \sigma_0 + \frac{K_{HP}}{\sqrt{d}} \quad (\text{III.23})$$

Les valeurs de σ_0 et K_{HP} prédites par chaque modèle et pour chaque matériau sont indiquées sur les figures FIG.III-21 et FIG.III-22.

Ces résultats sont en accord qualitatif avec les données expérimentales (Al-Haidary et al., 1983) (Thompson and Baskes, 1973) (Tabata et al., 1975).

Il est à noter que dans les calculs précédents, seuls le module élastique E_y et la contrainte critique résolue τ_0 changent d'un matériau à un autre, les distances critiques y_e et y_s étant les mêmes, égales à celles du cuivre. Toutefois, de nombreux travaux montrent que ces distances dépendent du matériau, notamment y_s qui dépend fortement de l'énergie de défaut d'empilement. Des calculs ont été effectués mais cette fois-ci en utilisant les distances critiques mesurées expérimentalement pour chaque matériau. Ces valeurs sont résumées dans le tableau TAB.III-7.

Matériau	EFE (mJ.m-2)	y_e (nm)	y_s (nm)
316L	25	1 [Feaugas, 1999]	10 [Feaugas, 1999]
Cu	70	1,6 [Essmann and Mughrabi, 1979]	50 [Essmann and Mughrabi, 1979]
Ni	90	2 [Hähner et al.,1998]	50
Al	200	3 [Kassner et al., 2000]	300 [Feaugas, 1999]

TAB.III-7 : valeurs expérimentales des distances critiques pour les quatre matériaux étudiés.

La figure FIG.III-23 présente l'évolution de la pente K_{HP} correspondant à l'équation (III.23) en fonction de l'énergie de faute d'empilement, normalisée par le produit $\mu \times b$, en ne considérant que les distances critiques du cuivre et en prenant en compte les valeurs de ces distances pour les différents matériaux. Des valeurs expérimentales de K issues de la littérature sont également présentées pour comparaison. On note que pour les deux modèles (Kröner et Hill-Hutchinson), la prise en compte de la dépendance des distances critiques y_e et y_s n'induit que peu de différence par rapport aux résultats obtenus en considérant les mêmes distances critiques du cuivre polycristallin. Nous remarquons également que les prédictions des deux modèles vont dans le même sens que les données expérimentales : la pente K_{HP} dépend de l'énergie de faute d'empilement. Les deux modèles prédisent convenablement la limite élastique (et donc le paramètre K_{HP}) pour de grandes valeurs de l'énergie de défaut d'empilement normalisée ($EFE/\mu b$) correspondant à l'absence d'empilements dans le matériau. Au fur et à mesure que l'énergie de défaut d'empilement diminue, le modèle sous-estime de plus en plus la valeur de K_{HP} . Cette sous-estimation peut être due à la présence d'empilements dans les matériaux planaires comme l'acier 316L(N). Notons qu'à haute température, les empilements de dislocations sont de plus en plus rares dû à l'activation thermique des mécanismes tels que la montée et le glissement dévié et l'effet de la taille de grains est moindre.

En outre, il faut noter la dispersion des données expérimentales qui peuvent différer d'un auteur à un autre (voir Haddou, 2003). Par conséquent, ces comparaisons sont à considérer à titre indicatif.

Enfin, nous tenons à souligner que bien que l'approche adoptée dans la prise en compte de l'effet de la taille de grain soit relativement simple, des études montrent toutefois que ce type de modèle décrit mieux l'effet de la taille de grains que des modèles plus élaborés introduisant les densités des dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) (Fionn and Dunne, 2015) ou encore des modèles prenant en compte les contraintes non locales dans un voisinage de rayon R . Ces derniers montrent un effet entre 1 et 10 μm , ce qui n'est pas observé expérimentalement (Evers et al., 2004).

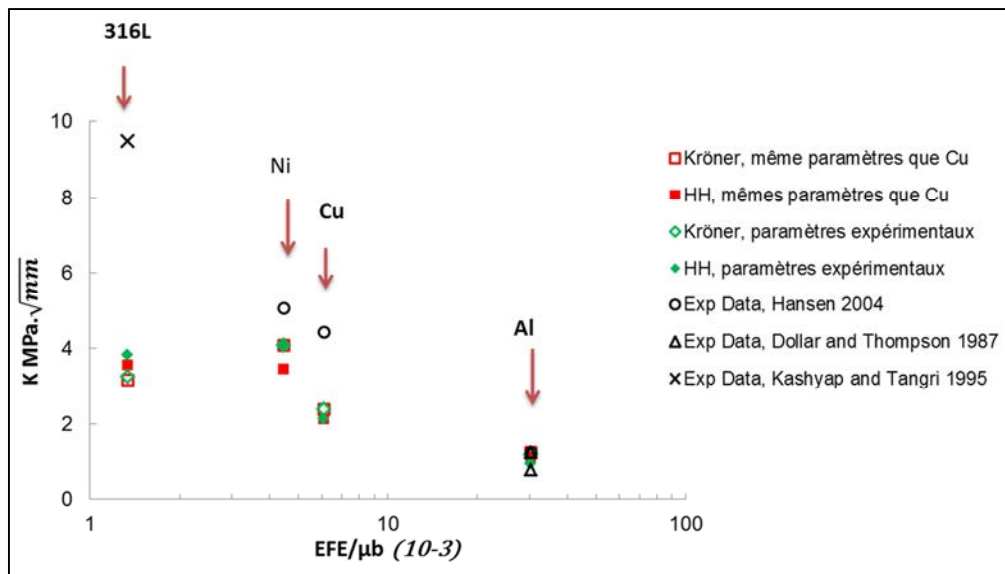


FIG. III-23: évolution de la pente K en fonction de l'énergie de faute d'empilement, correspondant à $\sigma_{0.2\%}$. Les valeurs expérimentales de K_{HP} sont également présentées pour comparaison.

Enfin, nous nous sommes intéressés à l'évolution de la densité totale des dislocations telle que prédite par les deux modèles. La FIG.III-24 montre les résultats obtenus pour l'acier 316L, les deux autres polycristaux (Cu et Al) présentent des tendances similaires. Les deux modèles prédisent une variation de la densité des dislocations en fonction de la taille de grains. Plus la taille de grains est faible plus la densité des dislocations est importante. Ce résultat est en accord avec de nombreuses études expérimentales ((Alhaidary et al.,1983) et (Hansen, 1977) pour l'aluminium, (Narutani and Takamura, 1991) pour le nickel, (Jiang et al., 1995) et (Hansen and Huang, 1998) pour le cuivre). Les joints des grains étant des obstacles au mouvement des dislocations, une faible taille de grains induit un libre parcours moyen court et un blocage relativement rapide des dislocations mobiles qui seront stockées près des joints des grains. Ce mécanisme de stockage combiné à des mécanismes de multiplication des dislocations (les joints des grains sont également des sources de dislocations) est plus actif dans le cas de petites tailles de grains (plus d'obstacles et donc plus de sources) induisant une densité des dislocations plus importante.

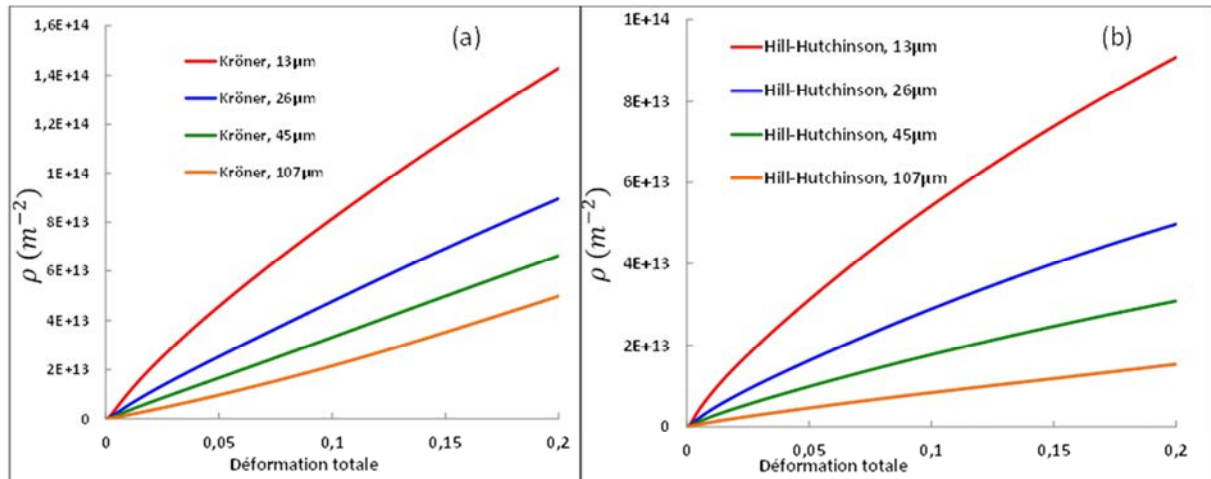


FIG. III-24: Evolution des densités des dislocations totales pour différentes tailles de grains prédites par (a) le modèle de Kröner (b) modèle de Hill-Hutchinson. Acier 316L

7. Conclusion

Un modèle de comportement élasto-plastique adapté aux métaux et alliages de structure cubique à faces centrées (CFC) a été proposé. Les lois du modèle sont basées sur des mécanismes physiques et utilisent les densités de dislocations comme variables internes. Trois familles de dislocations sont distinguées : dislocations vis, dislocations coin et les dipôles.

Le modèle permet une description physique des mécanismes qui gouvernent la mobilité des dislocations sans nécessité d'ajustement d'aucun paramètre sur les courbes macroscopiques. L'identification des paramètres est effectuée à l'échelle du monocristal à l'aide des courbes de traction expérimentales disponibles dans la littérature. La dépendance entre le coefficient de production des dislocations des monocristaux et leurs orientations cristallographiques est introduite dans le modèle par l'établissement d'un critère permettant la distinction entre deux domaines dans le triangle standard.

Appliqué à prédire le comportement en traction monotone à température ambiante de différents métaux et alliages CFC, le modèle permet des prédictions qui sont qualitativement en accord avec les données expérimentales. Toutefois, la validité quantitative du modèle dépend du matériau et de la taille des grains. L'effet de la taille de grains est introduit dans le modèle d'une manière relativement simple ce qui peut expliquer les résultats.

La suite de ce travail (chapitre 4 et 5) sera consacrée au domaine des températures élevées (entre 500 et 650°C). L'augmentation de la température s'accompagne par un changement du mode de déformation associé aux mécanismes thermiquement activés (glissement dévié, montée...). Par conséquent, l'expérience montre que l'effet de la taille de grains sur les courbes de traction décroît avec l'augmentation de la température avec notamment la disparition progressive du stade II ([Hug et al., 2013], [Carreker and Hibbard, 1953]). Ces arguments justifient l'extension du modèle au domaine des hautes températures (Chapitres 4 et 5).

8. Références

- Al-Haidary, J. T., Petch, N. J. and De Los Rios, E. R., 1983. Philosophical Magazine A, vol. 47, p. 869.
- Aldazabal, J. and Gil Sevillano, J., 2004. Materials Science and Engineering A, vol.365, p.186.
- Ashby, M. F., 1970. Phil. Mag., vol. 21, p.399.
- Basinski, S. J. and Basinski, Z. S., 1979. Dislocations in Solids, chapitre 16, p.261. North-Holland Publishing Company.
- Basinski, Z. S., 1964. Disc Faraday Soc, vol. 38, p. 93.
- Bassani, J. L. and Wu, T. Y., 1991. Proc. Royal Soc. London A, vol.435, p.21.
- Brown, L. M., 2002. Philosophical Magazine A, vol. 82, p.1691.
- Berbenni, S., Favier, V., Berveiller, M., 2007. International Journal of Plasticity, vol. 23, p. 114–142.
- Caillard, D. and Martin, J. L., 2003. Thermally activated mechanisms in crystal plasticity, volume 8. Pergamon Materials Series.
- Carreker Jr., R. P., Hibbard Jr., W. R., 1953. Acta Metallurgica, vol. 1, p.654.
- Catalao, S., Feaugas, X., Pilvin, P., and Cabrillat, M. T., 2005. Materials Science and Engineering A, vol. 400, p. 349.
- Chiu, Y.L., Veyssi re, P., 2008. Mater Sci Eng A, vol.483–484, p. 191.
- Conrad, H. and Jung, K., 2005. Materials Science and Engineering A, vol.391, p.272.
- Clouet, E., 2015. Communication personnelle.
- Davis, R. S., Fleischer, R. L., Livingston, J. D. and Chalmers, B., 1957. Transactions AIME, Journal of Metals, p.136.
- Devincre, B., Hoc, T., and Kubin, L. P., 2008. Science, vol.320, p.1745.
- Devincre, B., Hoc, T., and Kubin, L. P., 2005. Materials Science and Engineering A, vol.400, p.182.
- Devincre, B., Hoc, T. et Kubin, L. P., 2005. Material Science and Engineering A, vol. 400, p. 182.
- Devincre, B., Kubin, L. P. et Hoc, T., 2006. Scripta Materialia, vol. 54, p.741.
- Differt, K. and Essmann, U., 1993. Mat. Sci. and Eng. A, vol.164, p.295.
- Essmann, U. and Differt, K., 1996. Materials Science and Engineering A, vol. 208, p.56.
- Essmann, U. and Mughrabi, H., 1979. Philosophical Magazine A, vol.40, p.731.
- Eshelby, D., Nabarro, F. R. N., and Franck, F. C. (1951). Phil. Mag., vol.42, p.351.
- Essmann, U., 1965. Phys Status Solidi, vol. 12 , pp. 707.
- Evers, L. P., Brekelmans, W. A. M., Geers, M. G. D., 2004. Int J Sol Struct, p. 5209-5230.
- Feaugas, X. 1999. «Contribution   la compr hension des m canismes de d formation plastique et d'endommagement des mat riaux». M moire d'habilitation   diriger les recherches.
- Fivel, M., 1997. Th se de Doctorat, Universit  Joseph Fournier- Grenoble.
- Fionn, Dunne, Imperial College, communication personnelle, 2015.
- Fran ois, D., Pineau, A., and Zaoui, A. (1991). Comportement M canique des Mat riaux, volume 1. Herm s, Paris.
- Franciosi, P., Berveiller, M. and Zaoui, A., 1980. Acta Metall., vol.28, p.273.
- Franciosi, P., 1978. Th se de Doctorat, Universit  Paris Diderot (Paris VII).
- Franciosi, P., 1984. Th se de Doctorat d'Etat, Universit  Paris Nord - Paris XIII.
- Frank, F. C., 1980. Proceedings of the Royal Society of London Series A - Mathematical Physical and Engineering Sciences, vol.371, p.136.
- Friedel, J., 1964. Dislocation. Pergamon Press.
- Gaudin, C., 2002. Th se de Doctorat, Universit  de Technologie de Compi gne.
- Gentet, D., 2009. Th se de Doctorat, Universit  de La Rochelle.
- Gerard, C., 2008. Th se de Doctorat, Universit  Paris XIII, Institut Gallil e.
- Gil Sevillano, J., Mughrabi, H., 1993. Plastic deformation and fracture of materials, VCH, Weinheim (FRG), p. 19.
- Giroux, P.-F., 2010. Th se de doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- G ttler, E., 1973. Phil. Mag., vol.28, p. 105.
- Haasen, P., 1958. Philosophical Magazine, vol. 3, p. 384

Haddou, H., 2003. Thèse de doctorat, Université de Technologie de Compiègne.

Hähner, P., Tippelt, B., and Holste, C., 1998. *Acta Materialia*, vol. 46, p. 5073

Hall, E., 1951. *Proc. Phys. Soc.*, B64, p.747.

Hansen, N., 1985. *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol.16A, p.2167.

Hansen, N., Huang, X., Hughes, D.A., 2001. *Mat. Sci. Eng. A*, vol.317 (2001), pp. 3–11

Hansen, N., 1977. *Acta Met.*, vol. 25, p. 863

Hansen, N., and Huang, X., 1998. *Acta Mater.*, vol. 46, p. 1827.

Hill, R., 1965. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol.13, p.89.

Hordon, M. J. and Averbach, B. L., 1961. *Acta Metall.*, vol. 9, p. 237.

Hirth, J.P., Lothe, J., 1992. *Theory of dislocations* Krieger, Malabar (Florida).

Huang, X., Winther, G., 2007. *Philos. Mag.*, vol.86, p. 5189.

Huang, X., and Hansen, N., 1997. *Scripta Mater.*, vol.37, p.1697.

Huang, X., 1998. *Scripta Mater.*, vol.38, p.1697.

Hug, E., Dubos, P. A., Keller, C., 2013. *Materials Science and Engineering A*, vol. 574, p. 253

Hutchinson, J.W., 1976. *Proc. Royal Soc. London A*, vol.348, p.101.

Hutchinson, J. W., 1964. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 12, p. 25.

Jiang, Z., Lian, J., and Baudelet, B., 1995. *Acta Metall. Mater.*, vol. 43, p. 3348.

Jago, R. A. et Hansen, N., 1986. *Acta Metallurgica*, vol. 34, p.1711.

Jensen, D., Thompson, A. et Hansen, N., 1989. *Metallurgical and Materials Transactions A*, vol. 20, p.2803.

Kashyap, B. P., Tangry, K., 1995. *Acta Metall Mater*, vol. 43, p. 3971.

Kassner, M. E., Pérez-Prado, M. T., Vecchio, K. S., and Wall, M. A., 2000. *Acta Materialia*, vol. 48, p. 4247.

Karamana, I., Sehitoglu, H., Maier, H.J., Chumlyakov, Y.I., 2001. *Acta Materialia*, vol.49, p.3919.

Kitajima, S., Kurishita, H., Sakurai, Y., 2009. *Memoirs of the faculty of engineering*, Kyushu University, vol. 69, p. 117.

Kocks, U.F., Mecking, H., 2003. *Prog Mater Sci*, vol. 48, p. 171.

Kröner, E., 1961. *Acta Metallurgica*, vol.9, p.155.

Kubin, L. P., Devincere, B., and Hoc, T., 2008a. *Materials Science and Engineering A*, vol.483, p.19.

Kubin, L.P., Devincere, B., Hoc, T., 2008b. *Acta Mater.*, vol.56, p.6040.

Li, J. C. M. and Chou, Y. T., 1970. *Metall. Trans.*, vol.1, p.1970.

Livingston, J. D., 1962. *Acta Metallurgica*, vol. 10, p. 229.

Madec, R., 2001. Thèse de Doctorat, Université Paris Sud - Paris XI - Orsay.

Madec, R., Devincere, B., Kubin, L. P., 2002. *Phys. Rev. Lett.*, vol.89, p. 255508

Mecking, H., 1973. Thèse d'habilitation, Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule, Aachen (Allemagne)

Mitchell, T.E., 1964. *Prog Appl Mater Res*, vol.6, p. 117.

Sauzay, M., 2008. *Int. J. Plast.*, vol. 24, p. 727.

Nabarro, F.R.N., 1986. *Strength of metals and alloys (proc. ICSMA 7)*, vol. 3 Pergamon Press, Oxford, p. 1667.

Narutani, T., Takamura, J., 1991. *Acta Metall.* vol. 39, p. 2037.

Petch, N. J., 1953. *J. Iron Steel Inst.*, vol.74, p.25.

Poirier, J. P., 1976. *Plasticité à haute température des solides cristallins*, Eroylles.

Saada, G., 1960. *Acta Metall*, vol.8, p. 841

Sansal, C., 2007. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris.

Sauzay, M., Kubin, L., 2011. *Progress in Materials Science*, vol. 56, p.725.

Schmid, E. and Boas, W., 1935. *Kristallplastizität mit Besonderer Berücksichtigung der Metalle*. Springer, New York.

Schwartz, J., 2011. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale Paris.

Sevillano, J. G., Flow stress and work hardening, in *Plastic Deformation of Materials*, édité par H. Mughrabi, vol.6, p.19.

Székel, F., Groma, I., and Lendvai, J., 2000. *Phys. Rev. B*, vol. 62, p. 3093.

Tabata, T., Takagi, K. et Fujita, H., 1975. Trans. JIM., vol. 16, p. 469.
 Takeuchi, T., 1975. Trans. JIM, vol.16, p.629.
 Takeuchi, T., 1976a. J. Phys. Soc. Jpn., vol.41, p.490.
 Takeuchi, T., 1976b. J. Phys. Soc. Jpn., vol.40, p.741.
 Thompson, A. W. et Baskes, M. I., 1973. Philosophical Magazine, vol. 28, p. 301
 Thompson, A.W. , 1977. Work hardening in tension and fatigue. In Work Hardening in Tension and Fatigue, p. 89. TMS-AISME.
 Thompson, A. W., Baskes, M., Flanagan, F., 1973. Acta Met., vol. 21, p. 1017.
 Wang, S.-L., Murr, L. E., 1980. Metallography, vol. 23, p. 203.
 Wu, T. Y., Bassani, J. L. et Laird, C., 1991.
 Wilcox, B. A. et Clauer, A. H., 1972. Acta Metallurgica, vol.20, p.743.
 Yu, X. X., Wang, C.-Y., 2009. Acta Mater., vol. 57, p. 5914.

IV. Prédiction du comportement elasto-visco-plastique de l'acier 316LN en fatigue-relaxation à haute température

1. Introduction

L'étude expérimentale du chapitre 1, associée à la synthèse bibliographique des différents travaux entrepris dans le but de caractériser le comportement mécanique à haute température de l'acier 316L(N) en fatigue pure et en fatigue-relaxation a permis de mettre en évidence et de différencier les mécanismes physiques régissant la déformation plastique au cours de ces chargements. Une attention particulière est portée aux mécanismes propres aux longs temps de maintien qui correspondent aux conditions en services. La modélisation peut alors être abordée dans le but d'élaborer un modèle capable de prédire le comportement dans un domaine difficilement accessible en laboratoire. Une prédiction correcte de ce comportement (contraintes-déformations) est primordiale dans le sens où ces contraintes et déformations (prédites) peuvent être utilisées par la suite dans les modèles de prédiction de durée de vie.

En général, les modèles de comportement peuvent se distinguer en deux grandes familles : des modèles phénoménologiques « macroscopiques » et des modèles physiques « micromécaniques ». L'approche phénoménologique est basée sur l'utilisation de variables macroscopiques de décrire directement les phénomènes observés. Bien qu'ils soient basés sur la thermodynamique des milieux continus [(Lemaitre and Chaboche, 1988), (Nouailhas, 1989)] et facilement utilisables dans les codes de simulation numérique, le lien entre le comportement macroscopique et les mécanismes physiques est parfois difficile à établir. De plus, l'identification des paramètres de ces modèles se fait généralement sur des courbes macroscopiques ce qui limite en principe leur validité au domaine expérimental de l'identification. Par conséquent, en dehors de ce domaine, les prédictions des modèles macroscopiques sont à considérer avec précaution puisqu'il s'agit d'extrapolations sans toujours de réels fondements physiques. La comparaison des prédictions hors la base expérimentale issues des différents modèles appliqués à la fatigue-relaxation montre des différences très importantes entre elles (Cailletaud et al., 1984).

Au contraire, la seconde approche est fondée sur une description plus physique des phénomènes que l'on souhaite prédire. L'aspect micromécanique de cette approche réside dans l'idée de vouloir décrire le comportement macroscopique du matériau à partir des mécanismes qui opèrent à des échelles inférieures (grains, systèmes de glissement, structures de dislocations...). L'avantage de ces modèles est leurs fondements physiques permettant de prendre en compte les mécanismes propres au domaine de validité souhaité, notamment le domaine de longs temps de maintien et de faibles déformations, difficilement accessible au laboratoire.

Dans le cadre de ce travail, une approche micromécanique est adoptée. Le modèle proposé est basé sur les densités de dislocations et différents mécanismes caractéristiques des chargements de fatigue avec temps de maintien sont introduits à l'échelle du système de glissement (écrouissage, restauration par annihilation des dislocations, DSA...). Ces différents mécanismes sont caractéristiques des chargements de fatigue et de fatigue-relaxation étudiés dans le chapitre I.

La première partie de ce chapitre est consacrée à la description du mécanisme de restauration lors du temps de maintien par annihilation des dislocations coins. Dans la seconde partie, l'attention est portée au phénomène du vieillissement dynamique (DSA) qui caractérise l'interaction entre les dislocations mobiles et les éléments en solution solide avec l'utilisation d'un modèle de durcissement liée à l'effet du DSA. La quatrième partie est consacrée à la présentation des modèles

d'homogénéisation simples adoptés dans cette étude permettant le passage de l'échelle monocristalline à l'échelle macroscopique. A partir d'un modèle cristallin simple, différents modèles à champs moyens (thermoélastique, viscoplastique et élasto-viscoplastiques) sont utilisés et leur validation effectuée par comparaison avec des résultats de calculs par Eléments Finis sur larges agrégats, pour différents jeux de paramètres cristallins (énergie et volume d'activation).

2. Description de la restauration durant la phase relaxation

Les études expérimentales évoquées au premier chapitre mettent en évidence un fort effet du temps de maintien sur les structures de dislocations développées au cours des chargements de type fatigue-relaxation. En effet, les arrangements de dislocations caractéristiques de la fatigue oligocyclique (murs dipolaires, BGPs, labyrinthes, cellules ...) ne se forment pas pour des temps de maintien suffisamment longs [(Tavassoli, 1986), (Sauzay et al., 2004)]. Cette désorganisation de la microstructure s'accompagne d'un appauvrissement en dislocations [(Rezgui, 1982), (Tavassoli, 1986)]. Les zones denses des structures de dislocations qui se forment en fatigue pure (veines, murs,...) sont constituées essentiellement de dipôles coins. Ainsi, le caractère de moins en moins marqué de ces structures périodiques en fatigue-relaxation est associée à l'annihilation thermiquement activée de ces dipôles par montée des dislocations coins, favorisée par l'activation thermique et la contrainte appliquée (Prinz et al., 1982). C'est ce mécanisme (montée) qui est adopté dans la présente étude pour modéliser la restauration durant le maintien.

2.1. Mécanisme de montée des dislocations

La montée correspond au déplacement des dislocations hors de leurs plans de glissement. Ce mouvement concerne particulièrement les dislocations à composantes coins qui dans des conditions de températures favorables peuvent contourner les obstacles en se déplaçant dans une direction perpendiculaire à leur plan de glissement. Il s'agit d'un processus lent et non conservatif qui se produit par l'émission ou l'absorption de défauts ponctuels (lacunes). Les phénomènes de transport des défauts ponctuels par diffusion étant en général plus rapides à des températures assez élevées, la montée est un mécanisme thermiquement activé qui opère seulement à haute température. La figure FIG.IV.1 illustre le processus de montée par absorption d'un atome (Hirth and Lothe, 1991).

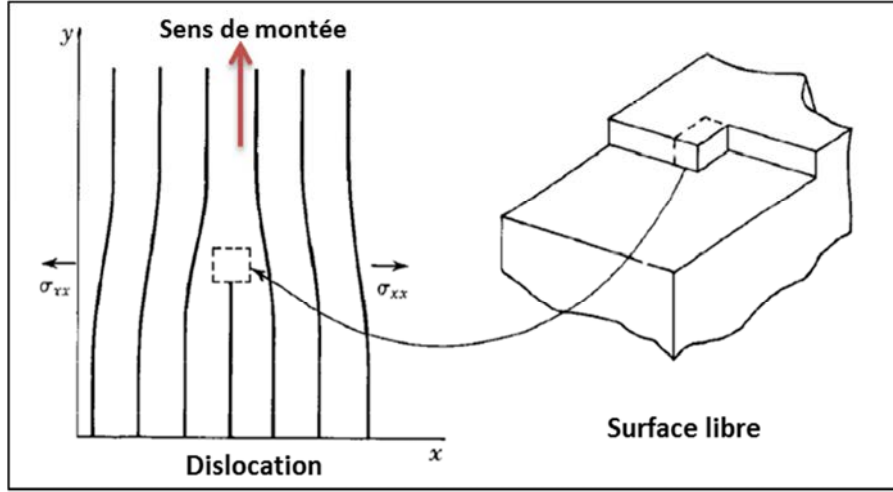


FIG. IV-1: schéma représentant la montée d'une dislocation coin par déplacement d'un atome de la surface au demi-plan de la dislocation (Hirth and Lothe, 1991). Une lacune est émise depuis la ligne de la dislocation.

L'énergie de formation d'un atome interstitiel étant très élevée, la montée des dislocations se fait généralement par absorption ou émission de lacunes dont la formation est largement facilitée par l'agitation thermique à haute température. La création et l'annihilation des lacunes s'effectuent en général en des positions localisées sur la ligne de dislocation, nommés crans. Ces derniers se déplacent le long de la ligne en absorbant ou en émettant des lacunes, induisant ainsi la montée de la dislocation perpendiculairement à son plan de glissement [(Martin, 2000),(Caillard and Martin, 2003)].

Lors de son mouvement, le cran est soumis à deux types de force : une force mécanique correspondant au travail de la contrainte appliquée et une force chimique ou *osmotique* due au gradient de la concentration des lacunes.

L'expression de la force mécanique se déduit de celle de la force de Peach-Koehler, seule la composante projetée suivant la normale au plan de glissement intervient au cours de la montée. Ainsi :

$$F_{cl} = [(\sigma \vec{b}) \times \vec{l}] \cdot \vec{n} \quad (IV.1)$$

σ étant la contrainte appliquée, \vec{b} le vecteur de Burgers, \vec{l} le vecteur de ligne, et \vec{n} la normale au plan de glissement définie par $\vec{n} = \frac{\vec{b} \times \vec{l}}{\|\vec{b} \times \vec{l}\|}$.

Quant à la force osmotique, elle est liée à une variation spatiale de la concentration en lacunes (Caillard and Martin, 2003). Cette force est donnée par :

$$F_{os} = \frac{kTb}{\Omega} \ln \frac{c_v^j}{c_v^0} \quad (IV.2)$$

Ω étant le volume atomique, k la constante de Boltzmann, T la température, c_v^0 la concentration des lacunes à l'équilibre loin de la dislocation et c_v^j la concentration des lacunes proche des crans. Pour des valeurs de $\frac{c_v^j}{c_v^0}$ proches de 1, la force osmotique s'exprime par :

$$F_{os} = \frac{kTb}{\Omega} \left(\frac{c_v^j}{c_v^0} - 1 \right) \quad (\text{IV.3})$$

En supposant que les crans sur la ligne de dislocation sont des sources et des puits parfaits de lacunes, la concentration des lacunes au voisinage de ces crans est à l'équilibre et s'exprime par [(Hirth and Lothe, 1991), (Turunen, 1976)]:

$$c_v^j = c_v^0 \exp\left(\frac{F_{cl}\Omega}{kTb}\right) \quad (\text{IV.4})$$

c_v^0 correspond à l'équilibre thermodynamique des lacunes dans le réseau et est donnée par :

$$c_v^0 = \exp \frac{U_f^v}{kT} \quad (\text{IV.5})$$

U_f^v étant l'énergie de formation d'une lacune.

La vitesse de montée d'une dislocation peut alors prédites par la théorie de la diffusion dans le cas d'une dislocation rectiligne infinie (Caillard and Martin, 2003) comme suit :

$$v_{cl} \approx 2\pi \frac{D_v}{b} c_j (c_v^j - c_v^0) \quad (\text{IV.6})$$

Avec D_v le coefficient de la diffusion des lacunes,

c_j la densité de crans, $c_j = \exp \frac{U_f^j}{kT}$ U_f^j étant l'énergie de formation d'un cran.

En insérant les équations IV.4 et IV.5 dans IV.6 et dans le cas de faibles contraintes appliquées ($F_{cl}\Omega \ll b kT$), la vitesse de montée peut se simplifier comme suit (Caillard and Martin, 2003) :

$$v_{cl} \approx 2\pi c_j \frac{D^{(sd)} \sigma_{cl} b^2}{kT} \quad (\text{IV.7})$$

$D^{(sd)}$ est le coefficient d'autodiffusion des lacunes, $D^{(sd)} = D_v c_v^0$.

σ_{cl} est la composante normale au plan du glissement de la contrainte, $\sigma_{cl} = F_{cl}b$.

2.2. Loi d'évolution des dipôles

Pour modéliser l'évolution des dipôles au cours de chargements aussi complexes que la fatigue-relaxation et la fatigue-fluage, il est essentiel de prendre en compte les différents mécanismes mis en évidence expérimentalement. Ces mécanismes sont identifiés et discutés dans le chapitre 1.

Dans le modèle proposé au chapitre III, une loi d'évolution des dipôles a été adoptée à partir du modèle de Differt et Essmann (1993) (équation III.9). Toutefois, ce modèle est adapté aux chargements de fatigue pure et ne prennent pas en compte la restauration de la microstructure opérant durant le maintien. Lors de la phase de relaxation, les dipôles ont tendance à s'éliminer par montée des dislocations due à la contrainte appliquée. Cette annihilation est plus ou moins spontanée aux températures suffisamment élevées pour lesquelles les mécanismes de diffusion sont

largement facilités (Feaugas et al., 2008). Afin de prendre en compte cette singularité du comportement en fatigue-relaxation par rapport à la fatigue pure, un second terme d'annihilation s'ajoute à l'équation bilan de la population des dipôles (III.9) présentée dans le chapitre III.

On définit t_{cl} , le temps nécessaire aux deux dislocations d'un dipôle pour se rapprocher suffisamment par montée puis s'annihilent spontanément. Le taux d'annihilation des dipôles durant ce temps s'écrit alors :

$$\dot{\rho}_d^{relax} = -\frac{\rho_d}{t_{cl}}, \rho_d \text{ étant la densité des dipôles}$$

Ainsi, pendant le temps t_{cl} , tous les dipôles existant à l'instant initial disparaissent. Ceux créés entre temps n'ont pas encore le temps de s'annihiler.

Le bilan des dipôles, sur un système de glissement, en fatigue-relaxation s'écrit alors :

$$\dot{\rho}_d = 2\rho_e \frac{h_{max}-y_e}{b} |\dot{\gamma}_p| - 2\rho_d \frac{y_e}{b} |\dot{\gamma}_p| - \frac{\rho_d}{t_{cl}} \quad (IV.8)$$

ρ_e est la densité des dislocations coins, $\dot{\gamma}_p$ la vitesse du glissement plastique, h_{max} la hauteur maximale d'un dipôle et y_e la hauteur minimale d'un dipôle.

Le temps de montée t_{cl} s'écrit :

$$t_{cl} = \frac{y_d - y_e}{v_{cl}} \quad (IV.9)$$

y_d est la hauteur moyenne des dipôles, elle est approchée par: $y_d - y_e \approx \frac{h_{max}}{2}$.

v_{cl} est la vitesse de montée exprimée par l'équation IV.7.

Dans l'équation IV.7, seule la contrainte appliquée est prise en compte dans le processus de la montée. Toutefois, l'interaction élastique entre les deux dislocations formant le dipôle peut induire des contraintes largement supérieures aux contraintes appliquées. Prinz et al. (1982) se basent justement sur la composante normale de la contrainte résultant de cette interaction pour calculer le taux d'annihilation des dipôles au cours de la relaxation. Dans le modèle adopté dans ce travail, les deux contraintes (macroscopique et locale) sont prises en compte dans l'expression de la vitesse de montée.

La contrainte normale résultant de l'interaction élastique entre les deux dislocations coins du dipôle, distantes de h , est donnée par :

$$\sigma_n^{elas} = \frac{\mu b}{\sqrt{2} \pi (1-\nu) h} \quad (IV.10)$$

Selon Prinz et al. (1982), le temps nécessaire pour que les deux dislocations coins du dipôle, de hauteur h , s'annihilent par montée est donné par l'expression suivante :

$$t_{cl} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \int_{y_e}^h \frac{dh}{v_{cl}(h)} \quad (IV.11)$$

La différence entre la formule IV.11 et celle proposée par Prinz et al. (1982) réside dans le fait que dans le cadre de notre approche on suppose que les deux dislocations du dipôle s'annihilent une fois que leur distance atteint la distance critique y_e .

Le calcul de t_{cl} à partir de l'équation peut se faire de deux manières, selon la valeur de la contrainte de montée τ_{cl} . Prinz et al. (1982) suppose que cette contrainte est égale à la contrainte d'interaction élastique entre les deux dislocations composant le dipôle. Cette contrainte est donnée par l'équation (IV.10) et en considérant la formule (IV.7) pour la vitesse de montée, on obtient un temps de montée exprimé par :

$$t_{cl} = \frac{kT(1-\nu)}{8 \mu b^3 c_j D^{(sd)}} [h^2 - y_e^2] \quad (IV.12)$$

Dans une seconde approche, la contrainte de montée prend également en compte l'effet de la contrainte macroscopique appliquée. Ainsi : $\sigma_{cl} = \sigma_n^{elas} + \Sigma^{norm}$.

Σ^{norm} étant la composante normale au plan de glissement de la contrainte macroscopique. par mesure de simplicité, nous faisons l'hypothèse que : $\Sigma^{norm} = \frac{\Sigma}{M}$, le coefficient M peut valoir 3,06 ou 2,24 selon le modèle de transition adopté (Taylor ou Sachs).

L'intégration de l'équation (IV.11) permet d'obtenir la formule du temps de montée nécessaire à l'annihilation d'un dipôle de hauteur h. afin de simplifier la formule on considère le changement de variables suivant :

$$A = \frac{\mu b}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}}, r_0 = \frac{A}{\tau_{macro}}, Y_e = \frac{y_e}{r_0}, H = \frac{h}{r_0}$$

$$t_{cl} = \frac{kT(1-\nu)}{4 \mu b^3 c_j D^{(sd)}} r_0^2 \left[H - Y_e + \ln \left(\frac{1+Y_e}{1+H} \right) \right] \quad (IV.13)$$

2.3. Prédiction du temps critique pour homogénéisation de la microstructure

L'étude expérimentale de l'effet du temps de maintien de la microstructure a montré que les structures de dislocations formées en fatigue-relaxation dépendent la durée du maintien. La microstructure devient de moins en moins marquée en augmentant la durée du maintien et devient homogène pour des temps suffisamment longs. Pour de faibles amplitudes de déformation totale imposée, les travaux de Tavassoli (1986) et de Sauzay et al. (2004) ainsi que les observations menées dans le cadre de cette étude ont montré que le temps de maintien critique nécessaire (t_h) pour faire disparaître la microstructure caractéristique de la fatigue pure dépend de la température. Le tableau TAB.IV-1 récapitule les temps d'homogénéisation identifiés expérimentalement pour les trois températures 500°C, 550°C et 600°C.

Température (°C)	Temps d'homogénéisation t_h (min)	Référence
500	3000	Présent travail
550	300	Sauzay et al., 2004
600	30	Tavassoli, 1986

TAB.IV-1: temps d'homogénéisation critiques expérimentaux pour différentes températures, acier 316LN

La figure FIG.IV-2 présente le tracé de t_h en fonction de $\frac{1}{RT}$ à partir des données expérimentales, R étant la constante des gaz parfaits. Le temps de maintien critique pour éviter l'apparition des microstructures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure dépend fortement du niveau de déformation imposé. Ainsi, pour chaque température (entre 500 et 600°C), les temps de maintien minimal et maximal mesurés sont rapportés sur la figure FIG.IV-2. Par conséquent, nous obtenons trois droites correspondant à trois valeurs d'énergie d'activation : une valeur maximale de 258 KJ/mole, une valeur minimale de 150,5 KJ/mole et une valeur moyenne de 219,5 KJ/mole. La valeur maximale de l'énergie d'activation est assez proche de l'énergie d'autodiffusion dans l'austénite $Q_\gamma^{sd} = 284 \text{ KJ/mol}$ (Heumann, 1968). En prenant en compte la dispersion des mesures expérimentales ainsi que le peu de données disponibles à 550°C et 500°C permettant une évaluation précise du temps de maintien critique, nous pouvons faire l'hypothèse que le mécanisme expliquant l'homogénéisation de la microstructure pour des temps de maintiens suffisamment longs serait l'annihilation des dipôles coins par montée des dislocations assistée par la diffusion des lacunes.

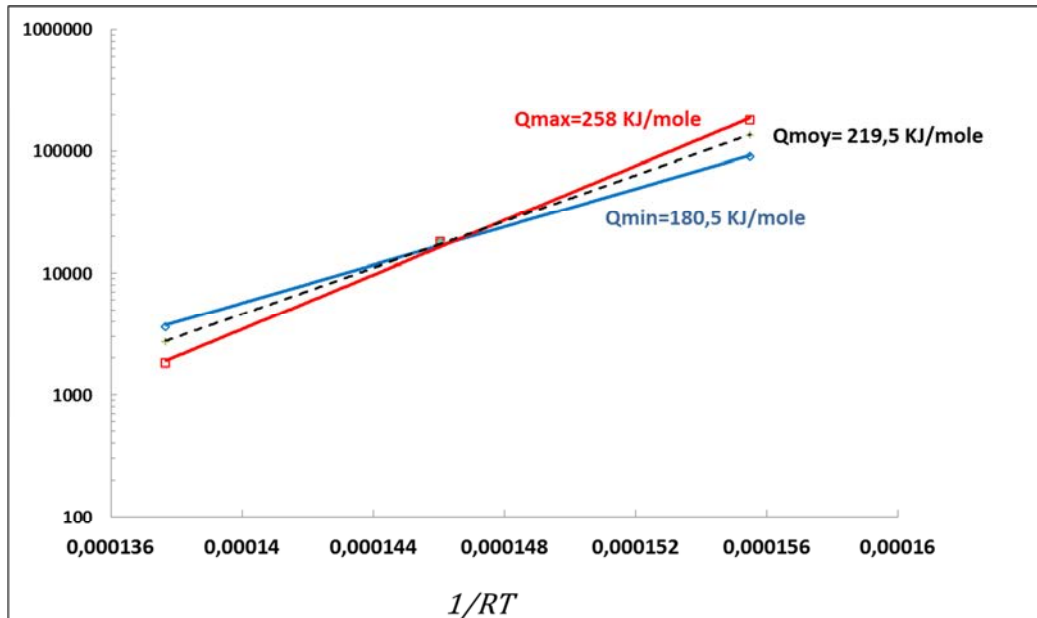


FIG. IV-2: tracé de $\ln(t_h)$ en fonction de $\frac{1}{RT}$ à partir des données expérimentales, acier 316LN

Par conséquent, une première approche relativement simple, visant à prédire le temps critique de maintien pour une homogénéisation de la microstructure (ie disparition des dipôles), est de l'approcher par le temps nécessaire pour faire disparaître les dipôles, c'est –à-dire :

$$t_h = t_{cl}$$

Dans un premier temps, on suppose que les dislocations sont saturées en crans : $c_j = 1$.

L'expression de la hauteur maximale h_{max} est établie en considérant un dipôle en équilibre sous la contrainte macroscopique et la force d'interaction élastique entre les deux dislocations. Elle s'exprime sous la forme :

$$h_{max} = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\tau} \quad \text{IV.14}$$

On ne prenant en compte que la contrainte macroscopique appliquée dans le calcul de la vitesse de montée, le temps de maintien critique s'exprime alors :

$$t_{cl} \approx \frac{\mu k T}{32 \pi^2 D^{(sd)}(\tau)^2 b} \quad \text{IV.15}$$

Le coefficient d'autodiffusion varie en fonction de la température sous la forme:

$$D^{(sd)} = D_0 \exp\left(-\frac{Q^{sd}}{RT}\right)$$

Le passage de la contrainte macroscopique (Σ) à la contrainte locale à l'échelle du grain (σ_{cl}) on utilise la relation $\sigma_{cl} = \tau = \frac{\Sigma}{M}$ avec $M=3.06$ pour un modèle de type Taylor.

Ainsi, le temps de maintien critique est donné par :

$$t_h \approx \frac{\mu k T M^2}{32 \pi^2 D_0(\Sigma)^2 b} \exp\left(\frac{Q^{sd}}{RT}\right) \quad \text{IV.16}$$

Pour l'application numérique, on considère une valeur de la contrainte macroscopique de l'ordre de 300MPa. Les paramètres physiques de l'équation IV.15 ne dépendant pas de la température sont résumés dans le tableau TAB.IV-2.

Paramètre	k (J/K)	M	Q^{sd} (KJ/mol)	D_0 (m ² /s)	R (J/mol.K)	b (m)
valeur	$1.38 \cdot 10^{-23}$	3.06	284	$4.9 \cdot 10^{-4}$	8.32	$2.56 \cdot 10^{-10}$

TAB.IV-2 : valeurs des paramètres physiques considérés comme indépendants de la température [(Heumann, 1968), (François et al., 1993)].

Le module de cisaillement μ dépend de la température comme il est montré dans le tableau TAB.IV-3. L'équation IV.16 est utilisée afin de prédire le temps de maintien critique nécessaire pour obtenir une microstructure complètement homogène. Les temps prédits ainsi que ceux déduits à partir des observations expérimentales sont présentés dans le tableau TAB.IV-3 et la figure FIG.IV-3, pour les trois températures 500°C, 550°C et 600°C.

Température (°K)	μ (GPa)	t_h prédit (min)	t_h expérimental (min)
773	66.17	3609,4	3000
823	65.23	268,4	300
873	64.29	27	30

TAB.IV-3 : Temps de maintien critique nécessaire pour obtenir une microstructure prédit par le modèle de montée pour différentes températures. Les valeurs expérimentales sont données pour comparaison [(Sauzay et al., 2004, (Tavassoli, 1986) et présent travail]. Acier 316LN

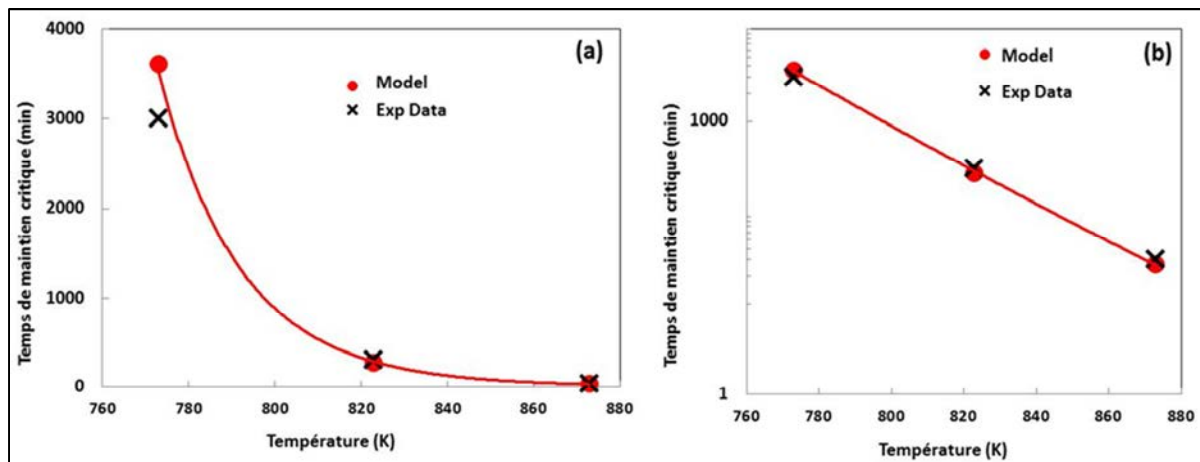


FIG. IV-3: temps de maintien critique t_h prédit par le modèle (Eq. IV16) pour différentes températures (a) en échelle normale (b) en échelle logarithmique. Les valeurs expérimentales sont également tracées. Diffusion volumique.

Les temps de maintien critiques, nécessaires pour faire disparaître les structures de dislocation caractéristiques de la fatigue pure, prédits par le modèle sont assez proches de celles déduits à partir des investigations expérimentales menées aux trois températures (500°C, 550°C et 600°C). L'écart relatif entre le modèle et l'expérience est de l'ordre de 17% à 500°C et de 10% pour les deux autres températures, ce qui est peu en l'absence de paramètres ajustables, avec une expression expérimentale du coefficient de diffusion et des incertitudes sur certains paramètres d'entrée. Le modèle est basé sur un mécanisme de restauration de la microstructure par montée des dislocations coins, induisant la disparition de la phase « murs » et une distribution homogène des dislocations. Cette montée est induite par la diffusion des lacunes, thermiquement activée, sous l'effet de la contrainte macroscopique.

Une deuxième approche, plus réaliste, consiste à supposer une concentration en crans c_j inférieure à 1. En effet, le calcul du temps nécessaire pour l'élimination d'un dipôle par montée adopté dans ce modèle est basé sur l'hypothèse d'une faible densité de crans (Caillard et Martin, 2003). Dans ce cas, il serait plus raisonnable de prendre en compte la contrainte locale résultant de l'interaction entre les deux dislocations composant le dipôle (Prinz et al., 1982). Dans ce cas, deux formules du temps de maintien critiques ont été trouvées (équations IV.11 et IV.12) selon si on prend en compte la contrainte macroscopique ou non. Pour l'application numérique, la hauteur moyenne des dipôles est

approchée par $\frac{h_{max}}{2}$. Les valeurs expérimentales de y_e sont issues des travaux de Catalao et al. (2005) pour un acier 316L pour les différentes températures (TAB.IV-4).

Température °K	773	823	873
y_e (m)	$3.3 \cdot 10^{-9}$	$3.6 \cdot 10^{-9}$	$4.4 \cdot 10^{-9}$

TAB.IV-4 : valeurs expérimentales de la distance critique y_e (Catalao et al., 2005).

La concentration de cran varie avec la température selon l'expression : $c_j = \exp(-\frac{U_j}{kT})$, U_j étant l'énergie de formation d'un cran. Les valeurs de l'énergie U_j varient entre 0,1 et 0,2ev selon Friedel (1963).

La figure FIG.IV-4 présente les valeurs du temps de maintien critique prédites pour deux valeurs de U_j : 0,2 et 0,3ev. Les courbes correspondant au modèle de Prinz sont celles obtenues avec la formule (IV.11) tandis que les courbes du modèle de Prinz modifié sont celles issues de l'équation (IV.12).

On constate une très faible différence entre les deux approches, la contrainte macroscopique affectant très peu les valeurs du temps de maintien critique prédit par le modèle. En effet, pour $h = \frac{h_{max}}{2}$, la valeur de la contrainte d'interaction élastique entre les deux dislocations coin du dipôles est de l'ordre de $8\sqrt{2} \times \tau$, largement supérieure à la contribution de la contrainte macroscopique.

On note que pour de fortes concentrations en crans (faibles U_j), le modèle prédit des temps de maintien critiques largement inférieurs aux temps expérimentaux, particulièrement aux plus faibles températures. Une énergie de formation de cran de l'ordre de 0.3eV est celle qui permet le meilleur accord entre les prédictions et l'expérience, bien que le modèle surestime le temps de maintien critique pour de faibles températures et sous-estime ce temps pour des températures de maintien élevées. Cette valeur de U_j est du même ordre de grandeur que la valeur rapportée pour l'aluminium à très forte énergie de faute d'empilement (EFE). Par contre, dans le cas des matériaux à faible et moyenne EFE, des calculs de dynamique moléculaire ont montré récemment que les valeurs de U_j peuvent être de l'ordre de 2 à 3eV lorsque l'EFE vaut 50mJ/m² [(Clouet, 2015), (Yu and Wang, 2009)]. Ainsi, pour l'acier 316L (N) dont l'EFE est faible, la valeur de U_j réelle est très grande pour qu'il y ait suffisamment de crans d'origine thermique permettant la montée des dislocations coins. Les crans nécessaires à une montée rapide des dislocations coins peuvent être induits par la plasticité et la traversée des arbres de la forêt par les dislocations mobiles. Il serait donc plus judicieux de calculer la concentration des crans c_j comme étant le nombre de crans créés par la plasticité.

Le nombre de crans induits par la traversée de la forêt pendant la durée de vie d'une dislocation coin est de l'ordre de $\frac{K \times K}{4}$, après avoir traversé environ $\frac{K \times K}{2}$ arbres dont la moitié est attractive (création de crans). K est le paramètre reliant le libre parcours moyen à la densité des dislocations $L_f = \frac{K}{\sqrt{\rho_t}}$. On se retrouve donc avec $0.25 \times K \times K$ crans le long d'un segment de

dislocation coin de $2 \times L_f$ de longueur. Ainsi, la concentration atomique des crans induits par la plasticité vaut : $c_j^{plast} = \frac{0.25 \times K \times K \times b}{2 \times K} \sqrt{\rho_{tot}} = 0.125 \times K \times b \times \sqrt{\rho_{tot}}$

Si nous remplaçons c_j par c_j^{plast} dans l'équation IV.13, nous obtenons les résultats présentés sur les figures FIG.IV-4c et d. Ces résultats montrent qu'il est possible d'approcher convenablement les temps critiques expérimentaux à partir du modèle de Prinz et Argon et en utilisant la densité de crans induits par la plasticité.

Il est à noter que les données expérimentales utilisées pour comparaison sont à considérer à titre indicatif. En effet, la valeur du temps de maintien dépend également de la déformation appliquée (Tavassoli, 1986). Aussi, pour la température 500°C, un temps de maintien critique de 50h est fort probablement surestimé. Des observations sont à effectuer pour des chargements de fatigue-relaxation avec des temps de maintien compris entre 10h et 50h afin de déterminer avec plus de précision le temps de maintien critique. De plus, dans le cadre de cette étude, seul le niveau de déformation 0.3% a été investigué.

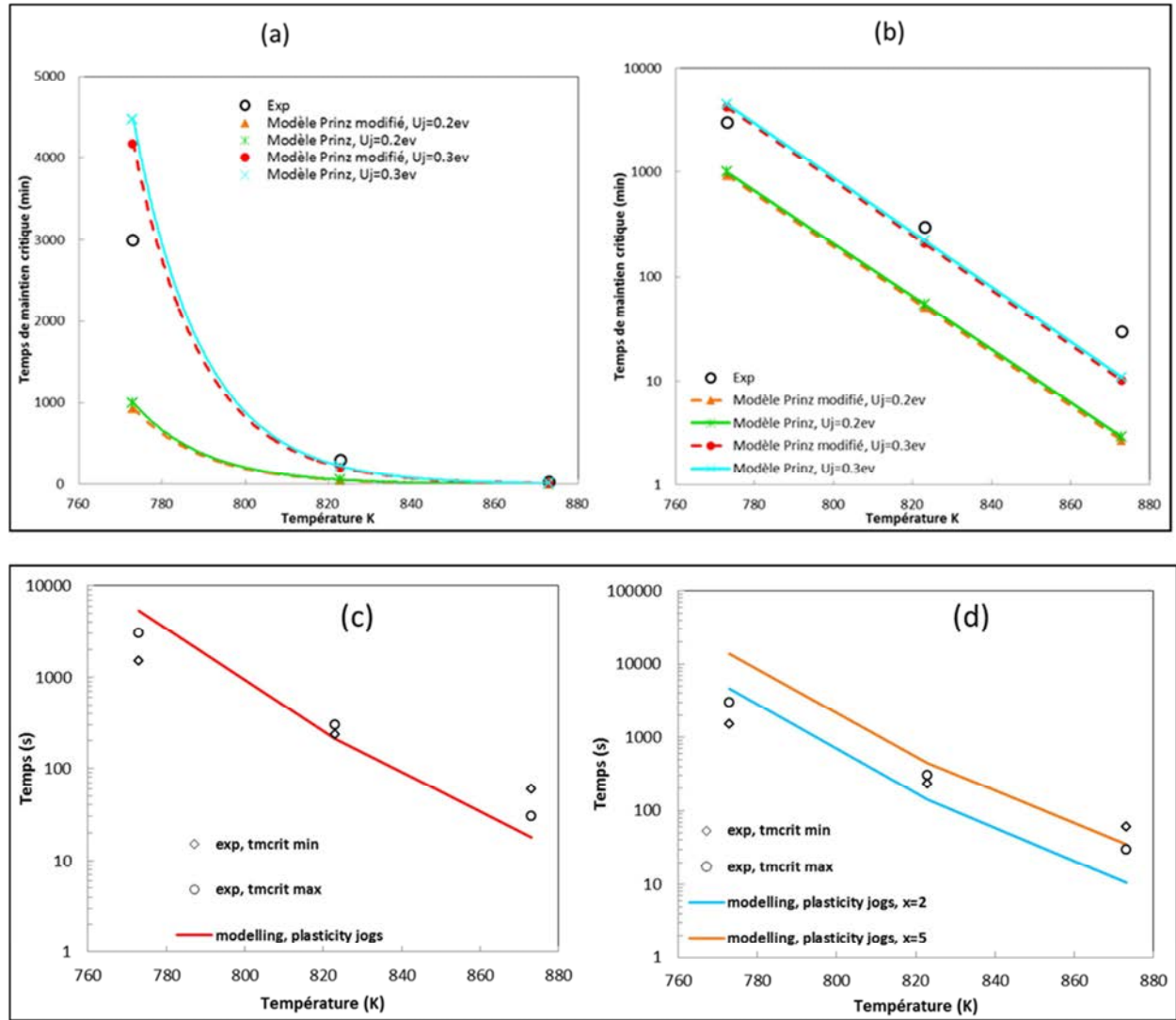


FIG. IV-4: (a) et (b) temps de maintien critique prédit par le modèle de montée prenant en compte une faible densité de crans et la contrainte élastique interne du dipôle (modèle de Prinz et al. 1982). (c) et (d) modèle de Prinz et Argon utilisant la densité des crans induits par la plasticité c) temps d'annihilation du dipôle ; d) prise en compte de la fatigue-relaxation ($x=2$ ou 4, voir FIG.IV-5). Acier 316LN.

Enfin, le temps du maintien peut également se déduire de l'équation bilan des dipôles (IV. 8) moyennant quelques hypothèses. En effet, dans ce bilan on distingue deux premiers termes de production/annihilation des dipôles durant la partie « fatigue pure » du cycle et un second terme d'annihilation des dipôles par montée qui se produit essentiellement durant le maintien. Si on suppose qu'à saturation et pour un maintien suffisamment long, les dipôles créés durant le chargement disparaissent tous au court du maintien. Ainsi :

$$\Delta\rho_{d,tot} = 2\Delta\rho_d^{cyc} - \Delta\rho_d^{maintien} = 0$$

En utilisant l'équation IV.8 et après intégration sur le cycle stabilisé, on obtient :

$$\frac{t_h}{t_{cl}} \approx 2 \left(\frac{h_{\max} - y_e}{b} \frac{\rho_e}{\rho_d} - \frac{y_e}{b} \right) \Delta \gamma_e^p \quad \text{IV.17}$$

ρ_e étant la densité des dislocations coins libres et ρ_d la densité des dipôles et $\Delta \gamma_e^p$ le glissement plastique des dislocations coin. Dans notre cas on fait l'hypothèse que $\Delta \gamma_e^p = \frac{\Delta \gamma^p}{2} = M * \frac{\Delta E^p}{2}$ (ΔE^p est la déformation plastique macroscopique axiale). On pose : $x = \frac{\rho_e}{\rho_d}$.

Le temps de montée t_{cl} est calculé grâce à la formule simple de l'équation IV.15 en prenant $c_j=1$ et en ne considérant que la contrainte macroscopique. Pour l'application numérique la contrainte macroscopique est prise égale à 300MPa et la déformation plastique macroscopique de l'ordre de 0.0012. Les autres paramètres ont les mêmes valeurs que celles présentées auparavant (TAB.IV-2 et TAB.IV-3), pour un acier 316LN.

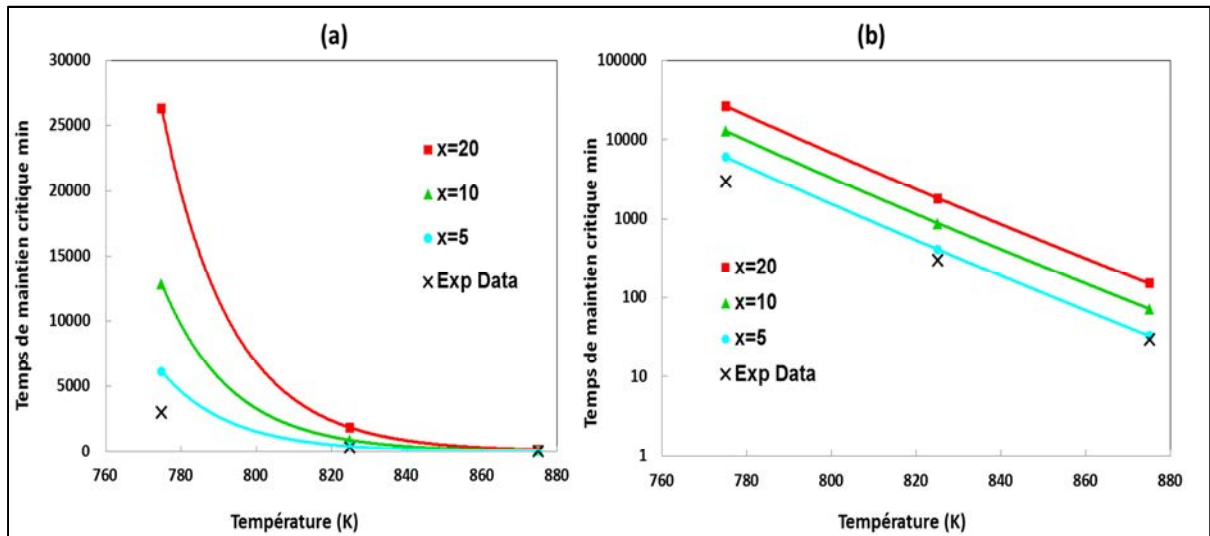


FIG. IV-5: (a) Temps de maintien critiques prédits par le modèle élaboré à partir de l'équation bilan des dipôles (b) mêmes courbes en échelle logarithmique, les points expérimentaux sont également présentés pour comparaison.

La figure FIG.IV-5 présente les temps de maintien critiques prédits par le modèle pour les trois températures et ce pour différents ratios $x = \frac{\rho_e}{\rho_d}$. Les observations menées sur des microstructures correspondant à des chargements de fatigue-relaxation avec des temps de maintien suffisamment longs, montre une microstructure très homogène combinée à une disparition de la phase dipolaire (murs, veines, cellules...). Ces structures homogènes correspondent à des valeurs de x élevées, i.e une forte densité de dislocations coins mobiles et une faible densité de dipôles. Dans les conditions considérées pour le calcul, les temps critiques prédits par le modèle sont assez proches des points expérimentaux pour une valeur de $x = 5$. Cette valeur est relativement élevée mais en absence de mesures quantitatives des densités de dislocations et vu la dépendance du temps de maintien critiques des conditions d'essais (contrainte et déformation), les prédictions présentées dans cette parties sont à considérer à titre qualitatif. En effet, les temps de maintien critiques expérimentaux mesurés par Tavassoli (1986) sur un acier 316LN à 600°C dépendent également du niveau de la déformation imposée, plus l'amplitude de déformation élevée plus le temps de maintien critique pour faire disparaître la microstructure est important.

Néanmoins, cette valeur demeure cohérente avec ce que l'on peut trouver dans la littérature. En général, la microstructure de dislocation qui se développe en fatigue pure se caractérise par l'apparition de deux « phases » : une phase dure, très denses en dislocations majoritairement sous forme de dipôles et une phase « molle », canaux, moins dense en dislocations supposées mobiles. En général, dans ce type de microstructure, la densité des dislocations formant les dipôles des mûrs (ρ_d) est suffisamment supérieure à celle des dislocations coin mobile (dans les canaux). Le rapport $\frac{\rho_d}{\rho_e} = \frac{1}{x}$ varie entre 2 et 10 [(Sauzay and Kubin, 2011), (Tippelt et al., 1997)]. Ainsi, notre modèle prédit un rapport de l'ordre de 1/5, largement faible pour former une structure de dislocation de fatigue pure.

Les prédictions du présent modèle permettent donc de confirmer que les mécanismes prépondérants dans des chargements de type fatigue avec de longs temps de maintien sont liées à l'activation thermique de la diffusion induisant une annihilation par montée des dipôles et donc une restauration de la microstructure.

3. Modélisation du vieillissement dynamique

3.1. Synthèse bibliographique

Les essais de traction à haute température et à différentes vitesses, entrepris lors de cette étude, ont permis de mettre en évidence et d'établir différents aspects liés au vieillissement dynamique (DSA). Ce dernier est fondamentalement lié aux interactions entre dislocations en mouvement et des atomes de soluté. Dans certaines conditions de température et de vitesse de déformation, les mobilités de ces défauts (dislocations et solutés) deviennent comparables et les atomes de solutés peuvent alors ségréger vers les dislocations, formant ainsi des nuages de soluté (appelés aussi atmosphères). La formation de ces nuages a pour incidence un freinage, voire un blocage des dislocations, nécessitant une contrainte supplémentaire afin de libérer les dislocations et les mettre en mouvement. Ce mécanisme explique l'apparition de serrations sur les courbes de traction (pics de contraintes) correspondant à des sauts de contraintes liés à des séquences répétées d'ancrage et de désancrage des dislocations mobiles.

Etant intéressés par la modélisation de phénomènes caractérisant la fatigue et la relaxation (et/ou fluage), nous devons prendre en compte le phénomène du DSA. Cette partie présente une revue bibliographique de différents modèles proposés par la littérature et qui permettent de décrire les mécanismes physiques liés aux interactions entre dislocations et atomes en solution solide. Dans un premier temps, on s'intéressera au durcissement induit par l'ancrage d'une dislocation par un atome de soluté. Ensuite, des modèles de durcissement par formation d'atmosphère de soluté seront introduits.

3.1.1. Modèles de durcissement par solution solide

3.1.1.1. Origines des interactions dislocations – atomes de soluté

Différents mécanismes peuvent être à l'origine de l'interaction entre dislocation et soluté. L'intensité de cette interaction et son effet sur le comportement macroscopique vont dépendre des caractéristiques physiques des impuretés et de la matrice. On distingue trois origines principales

[(Patinet, 2009), (François et al., 1995)] comme le schématise la FIG.IV-6 : effet de taille, de module élastique et effet chimique (Suzuki).

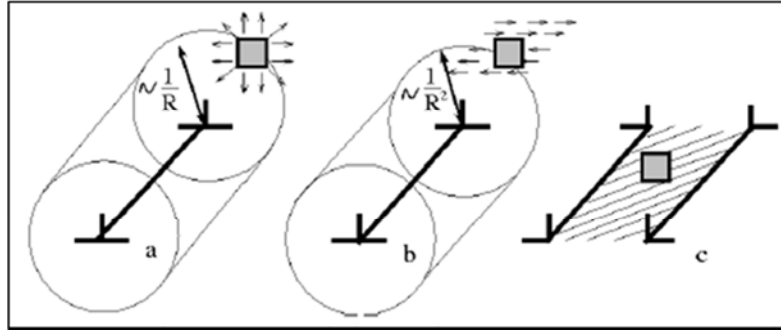


FIG. IV-6: différents origines de l'ancrage des dislocations par les atomes de soluté: (a) effet de taille, (b) effet de module (c) effet de Suzuki (faute d'empilement) (Patinet, 2009)

a. Effet de la taille :

Cet effet est lié à la différence de taille entre l'atome de soluté et l'atome de la matrice. L'introduction de l'atome étranger induit alors la création d'un champ de dilatation autour de lui qui va interagir avec le champ de contrainte créée par la dislocation. Plus précisément, l'interaction entre dislocation et atome de soluté provient de l'interaction des champs de pression hydrostatique de ces deux défauts. Ainsi, l'énergie associée à cette interaction correspond à l'opposé du travail nécessaire pour placer un atome de soluté dans le champ de pression d'une dislocation et s'exprime sous la forme (Hirth et Lothe, 1982) :

$$E = -\sigma_m \Delta v$$

Avec σ_m la contrainte hydrostatique, égale à la contrainte moyenne et Δv la variation du volume provoquée par l'atome de soluté. La variation du volume s'exprime en fonction du paramètre de la maille et du facteur de taille comme suit :

$$\Delta v = 4 \pi a_0^3 \epsilon_a \text{ avec } a_0 \text{ le rayon des atomes de la matrice et } \epsilon_a = \frac{\Delta a}{a_0}.$$

En considérant les formules permettant d'exprimer les champs de contrainte autour d'une dislocation, la portée de l'interaction liée à l'effet de taille est en $1/r$ avec r est la distance entre l'atome de soluté et le centre de la dislocation.

b. Effet de module :

Cet effet provient de la différence de module d'élasticité entre la matrice et l'atome de soluté. Eshelby (1957) a traité cet effet en assimilant l'introduction de l'atome de soluté à une inclusion modifiant localement la rigidité de la matrice. L'énergie de l'interaction due à la différence de

modules exprime la différence d'énergie élastique stockée dans le volume du soluté entre systèmes avec et sans soluté (Patinet, 2009).

La force d'interaction due aux effets de modules est un ordre de grandeur plus faible que celle dues aux effets de taille. En effet, la portée de cette interaction est en $1/r^2$ et serait donc une interaction à courte portée (Patinet, 2009).

c. Effet chimique (Suzuki)

Suzuki (1957) considère que le durcissement par solution solide est lié à la ségrégation des solutés sur les dislocations dissociées, notamment sur la faute d'empilement (FIG.IV-6c), stabilisant ainsi la dissociation et diminuant l'énergie de faute d'empilement (EFE). La baisse de l'EFE ainsi que la stabilisation des atomes de soluté sur le ruban de la faute peuvent provoquer un durcissement lié à un ancrage de la dislocation. Toutefois, ce durcissement n'est efficace qu'à basse température (François et al., 1995).

Dans la suite de cette étude, seul l'effet lié à la différence de taille entre la matrice et les atomes étrangers sera pris en compte. En effet, il s'agit de l'effet provoquant une interaction plus forte et à longue portée (en $1/r$). Dans ce cas et en supposant l'élasticité isotrope, l'énergie de liaison est donnée par l'expression :

$$U = \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{4 \mu b}{3 \pi} a_0^3 \epsilon_a \frac{\sin \theta}{r} \quad \text{IV.17}$$

r et θ étant les coordonnées de l'atome de soluté par rapport à la dislocation, a_0 le rayon atomique de la matrice, μ le module de cisaillement, b le vecteur de Burgers et ϵ_a le facteur de taille.

La force d'interaction soluté-dislocation peut alors être estimée à partir du potentiel de l'interaction U , sous la forme :

$$K = -grad U$$

3.1.1.2. Modèles analytiques du durcissement par solution solide (à 0K)

Différents modèles théoriques ont été proposés dans le but de calculer, ou du moins approximer, la contrainte nécessaire pour faire déplacer une dislocation dans une solution solide. Ces modèles permettent de décrire l'interaction entre un atome d'impureté isolé et une dislocation. Seuls les obstacles localisés sur le plan de glissement, et donc induisant le plus fort ancrage, sont considérés. La distribution des solutés est considérée parfaitement aléatoire. Chaque modèle décrit une configuration d'ancrage à laquelle sont associées une statistique d'interaction et une longueur caractéristique moyenne. La contrainte critique est calculée à partir de l'équilibre entre la force de Peach-Kohler et la force d'ancrage. Les différentes configurations traitées dans la littérature sont présentées sur la figure FIG.IV-7.

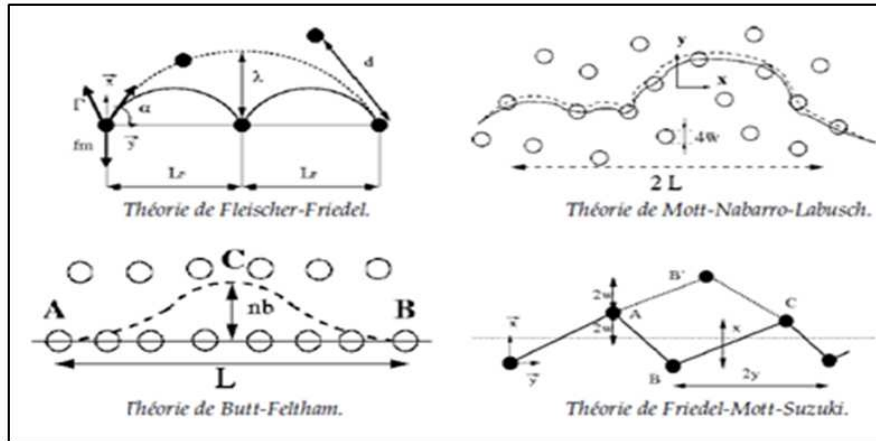


FIG. IV-7: les différentes configurations correspondant aux modèles théoriques de durcissement par solution solide (Patinet, 2009)

De façon générale, et en accord avec les résultats expérimentaux, ces modèles permettent de relier la contrainte critique résolue à la concentration atomique en soluté selon la loi suivante :

$$\tau_c = \tau_p + A c^r \quad \text{IV.18}$$

τ_p étant la contrainte de Peierls du métal pur (très faible pour les métaux CFC), A une constante dépendant de la force d'interaction entre la dislocation et le soluté et r un exposant dépendant de la statistique du durcissement (Patinet, 2009).

a. Statistique de Fleisher-Friedel

Ce modèle suppose que la dislocation se courbe entre les points d'ancrage sous l'effet de la contrainte appliquée. Ces points d'ancrage (atomes de soluté) sont supposés distribués de manière aléatoire. Friedel (1964) fait l'hypothèse que l'aire balayée par la dislocation après décrochage est égale à l'aire contenant un obstacle. Cette aire est égale à b^2/c , b étant le module du vecteur de Burgers et c la concentration en obstacles. La contrainte critique est donnée par l'équilibre entre la force de Peach-Koehler et la force maximale que l'obstacle peut exercer K. la force K est ensuite calculée en considérant l'équilibre entre cette force et la tension de ligne d'une part et la contrainte appliquée d'autre part (voir détails dans François et al., 1995).

Selon ce modèle, la contrainte critique est reliée à la concentration selon la formule suivante :

$$\tau_c = 0,1 \mu \epsilon_a^{3/2} \sqrt{c} \quad \text{IV.19}$$

μ étant le module de cisaillement de la matrice, ϵ_a le facteur de taille et c la concentration en soluté (François et al., 1995).

Toutefois, ce modèle n'est applicable que pour de faibles valeurs de la concentration et pour des atomes ayant de faibles interactions avec les dislocations. Ceci se traduit par un faible rapport entre la force d'interaction dislocation-atome de soluté et la tension de ligne de la dislocation et un facteur de Labusch $\beta > 1$, $\beta = \frac{3\sqrt{3}}{32} \epsilon_a c$.

b. Statistique de Mott

Dans le cas d'une forte interaction entre la dislocation et les atomes de soluté, i.e $\beta < 1$, une autre statistique a été proposée par Mott (1952). Ce modèle suppose que l'interaction soluté-dislocation possède une distance d'interaction. La dislocation est considérée comme une ligne élastique continue dont le cœur interagit avec plusieurs atomes de soluté à la fois. La ligne est contenue dans un ruban de largeur w (FIG.IV-8). L'équilibre des forces permet d'obtenir l'expression de la contrainte critique sous la forme (voir détails dans François et al. (1995)) :

$$\tau_c \cong 0,136 \mu \epsilon_a^{4/3} c^{2/3} \quad \text{IV.19}$$

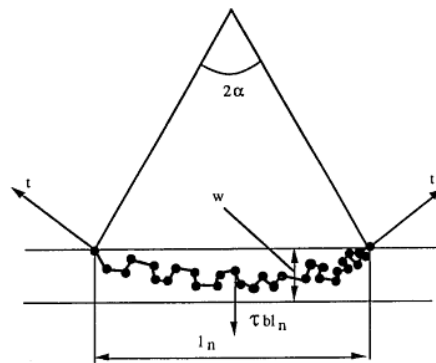


FIG. IV-8: statistique de Mott (François et al., 1995)

c. Théorie de Friedel-Mott-Suzuki

Selon cette théorie [(Friedel, 1963), (Suzuki et al., 1991)], la dislocation prend une forme en « zigzag » sous l'effet de l'ancrage par les atomes de solutés se trouvant sur son plan de glissement. Friedel (1964) fait l'hypothèse que le nombre d'atomes de soluté contenus dans l'aire de glissement (xy , FIG.IV-7) est égal à c/b^2 . En minimisant la différence entre l'énergie de liaison dislocation-soluté et l'énergie due à la tension de ligne, Friedel calcule l'amplitude du zigzag dans le plan du glissement (x , FIG.IV-7). Pour calculer la contrainte critique nécessaire au décrochage de la dislocation, le travail de la contrainte est pris égal à la différence des énergie entre la position zigzag et la position à mi-chemin du prochain obstacle (position d'énergie maximale) (François et al., 1995). On obtient alors :

$$\tau_c = \frac{\mu \epsilon_a c}{4} \quad \text{IV.20}$$

3.1.2. Modèles de durcissement par formation d'atmosphères

Dans le cas du phénomène de vieillissement dynamique, les interactions entre les dislocations et les atomes de soluté se caractérisent par des énergies relativement fortes. La diffusion des atomes de

soluté est favorisée par les conditions en température et en vitesse de déformation induisant la formation de nuages ou d'atmosphères autour des dislocations. L'ancrage des dislocations est beaucoup plus fort que dans le cas où les atomes de soluté distribués aléatoirement et le supplément de contrainte nécessaire pour libérer les dislocations est par conséquent plus important.

Parmi les premières interprétations à l'échelle microscopique du phénomène de vieillissement dynamique fut celle proposée par Cottrell et Bilby (1949). En effet, ces derniers ont attribué ce phénomène macroscopique à l'interaction dynamique entre les nuages d'impuretés et les champs de contraintes associés aux dislocations. En se basant sur les modèles de diffusion d'atomes de solutés sous l'effet d'une force mécanique, Cottrell [(Cottrell and Bilby, 1949), (Cottrell, 1948)] estime la vitesse de déplacement des atomes diffusant ainsi que la concentration d'atomes de solutés sur la ligne de dislocation. Dans ses calculs, l'interaction dislocation-soluté est liée à l'effet de taille et le potentiel d'interaction s'exprime sous la forme :

$$U = \frac{B}{r} \quad \text{IV. 21}$$

La vitesse de migration des atomes de soluté est donnée par :

$$\vec{V} = -\frac{D}{kT} \overrightarrow{\text{grad}} U = \frac{D}{kT} \frac{B}{r^2} \quad \text{IV. 21}$$

En calculant le rayon de l'atmosphère en fonction du temps, Cottrell propose une expression de la concentration des atomes de soluté autour de la dislocation après un temps de vieillissement t_a .

$$c = \frac{\pi c_0}{b^2} \left(\frac{3BD}{kT} t_a \right)^{2/3} \quad \text{V. 22}$$

c_0 correspond à la concentration nominale en soluté, D le coefficient de diffusion de l'atome de soluté, k la constante de Boltzmann et T la température.

Selon Cottrell et Bilby (1949), t_a et le temps effectif de l'immobilisation de la dislocation par les obstacles.

Cette cinétique a ensuite été modifiée par Louat (1981) en prenant en compte la saturation en atomes de soluté. L'auteur a supposé que la probabilité qu'un atome de soluté occupe un site au cœur de la dislocation était proportionnelle à la fraction des sites libres. Ainsi, la concentration en atomes de soluté ayant migré vers la ligne de la dislocation s'exprime sous la forme :

$$c = c_{\text{sat}} \left(1 - \exp \left(-\frac{c_0}{c_{\text{sat}}} \left(\frac{t_a}{\delta} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \right) \quad \text{IV. 23}$$

c_{sat} est la concentration à saturation et s'exprime sous la forme (Louat, 1981):

$$c_{\text{sat}} = \frac{c_0}{c_0 + \exp \left(-\frac{B}{bkT} \right)} \quad \text{V. 24}$$

$$\text{Et } \delta = \left(\frac{2c_{\text{sat}}}{3c_0} \right)^{3/2} \frac{kTb^3}{2BD}.$$

Selon différents auteurs [(Van den Beukel, 1975), (Sleeswyk, 1958), (McCormick, 1972)], le vieillissement dynamique est supposé dû à la ségrégation des atomes de soluté autour de la dislocation durant son temps d'attente t_w sur des obstacles extrinsèques (arbres de forêt par exemple). Le temps de vieillissement t_a est alors supposé égal à t_w et s'exprime en fonction de la vitesse de la dislocation v et de la distance entre obstacles extrinsèques sous la forme :

$$t_a = t_w = \frac{L}{v}$$

McCormick (1988) a ensuite montré que la concentration en solutés ségrégés autour des dislocations c , ne répond pas instantanément à un changement de vitesse de déformation mais passe par un régime transitoire avant de se stabiliser. Ainsi, McCormick (1988) a introduit une cinétique de relaxation dans la formule du temps de vieillissement sous la forme :

$$\frac{dt_a}{dt} = 1 - \frac{t_a}{t_w} \quad \text{IV. 25}$$

Il est à noter que cette expression reste néanmoins phénoménologique.

Les dislocations mobiles sont généralement stoppées par des arbres de forêt. Ainsi, la distance L peut s'exprimer en fonction de la densité totale de dislocations $= 1/\sqrt{\rho_t}$.

En utilisant la relation d'Orowan : $\dot{\gamma}_p = b \rho_m v$, $\dot{\gamma}_p$ étant la vitesse du glissement plastique et ρ_m la densité des dislocations mobiles. Ainsi, le temps d'attente s'exprime par :

$$t_w = \frac{\rho_m \times b}{|\dot{\gamma}_p| \times \sqrt{\rho_t}} \quad \text{IV. 26}$$

Un des résultats macroscopiques du phénomène du vieillissement dynamique est la dépendance négative de la contrainte à la vitesse de déformation. Van den Beukel (1975) et Mulford and Kocks (1979) ont proposé des modèles permettant de calculer la sensibilité d'un alliage à la vitesse de déformation. Dans les deux modèles, la contrainte est décomposée linéairement en deux composantes, l'une correspondant au durcissement par solution solide et donc reliée à la concentration en solutés σ_f , l'autre à l'écrouissage par la déformation σ_0 .

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_f$$

Van den Beukel (1975) suppose que le vieillissement dynamique affecte la contrainte de friction σ_f en diminuant l'espacement des obstacles le long de la dislocation. Cette contrainte est définie par la formule :

$$\sigma_f = f \mu \frac{b}{l}$$

f étant un facteur décrivant l'interaction dislocation-soluté et l l'espacement moyen entre atomes de soluté le long de la dislocation.

La variation de la concentration en solutés le long de la dislocation induit une variation de la contrainte de friction :

$$\Delta\sigma_f = f \mu \Delta c$$

Δc correspond à la concentration en atomes de soluté ségrégés le long de la dislocation durant le vieillissement.

Mulford et Kocks (1979) supposent en revanche que le phénomène du vieillissement affecte la contrainte σ_0 (due à l'écrouissage par la forêt). En effet, selon les auteurs, les atmosphères se forment sur les dislocations de la forêt immobiles et sont trainés par un mécanisme de diffusion de cœur (pipe diffusion) le long des dislocations mobiles temporairement bloquées. Dans ce cas le vieillissement a pour effet l'augmentation de la force des jonctions des dislocations. Par conséquent :

$$\Delta\sigma_0 = f_0 \sigma_0 \Delta c$$

Dans l'expression de Δc , le coefficient de diffusion dans le volume D est remplacé par le coefficient de diffusion de cœur (pipe diffusion). f_0 est un coefficient décrivant l'interaction dislocation – soluté.

Pour les deux modèles, la sensibilité de la contrainte à la vitesse comporte, en plus du terme naturel de l'activation thermique, un terme négatif lié au vieillissement dynamique et donc à la concentration en atomes de soluté autour de la dislocation (qui dépend de la cinétique de la déformation). Une sensibilité négative est alors obtenue lorsque le terme liée au durcissement par formation d'atmosphères d'impuretés autour de la dislocation devient plus important que le terme lié à l'activation thermique.

3.1.3. Modèle adopté

Dans cette étude, le durcissement dû au vieillissement dynamique est introduit sous forme d'une contrainte critique. Dans la continuité du modèle basé sur la densité des dislocations présenté dans le chapitre 3, la contrainte isotrope totale sur chaque système de glissement i s'écrit sous la forme :

$$\tau_{\mu}^i = \tau_0 + \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} + \tau_{DSA} \quad \text{IV. 27}$$

Dans la mesure où on s'intéresse à des mécanismes actifs à haute température, la contrainte τ_0 , principalement liée à la friction du réseau (vallées de Peierls) ou encore à la solution solide, peut être négligée.

τ_{DSA} représente le durcissement induit par l'épinglage des dislocations par la formation d'atmosphères d'impuretés. Dans le cas des aciers austénitiques inoxydables 316L et 316LN, différents travaux dans la littérature attribuent le vieillissement dynamique aux interactions entre dislocations mobiles et atomes de chrome diffus [(Srinivasan et al., 1999), (Gerland et al., 1997), (Gentet, 2009)]. En effet, dans le domaine de hautes températures, l'énergie d'activation associée à l'apparition d'instabilités sur une courbe de traction pour l'acier 316LN est du même ordre que l'énergie de diffusion du chrome dans l'austénite (Choudhary, 2014).

Afin de choisir une statistique adaptée à cette configuration permettant de lier la contrainte τ_{DSA} à la concentration en atomes de soluté ségrégés autour de la dislocation il est nécessaire de comparer la force d'interaction atome de chrome – dislocation et la tension de ligne.

La force d'interaction dislocation-soluté se déduit à partir de l'expression du potentiel de cette interaction. Comme discuté précédemment, la plus forte interaction liée à l'introduction d'un atome étranger est celle induite par l'effet de la taille. Ainsi, l'énergie d'interaction est celle exprimée par l'équation IV.21 et par conséquent, la force d'interaction s'exprime par :

$$F = \|\vec{-gradU}\| = \frac{B}{r^2}$$

r étant la distance soluté-dislocation. La valeur maximale de F correspond à $r = b$ (cœur de la dislocation).

La tension de ligne est prise égale à $\frac{\mu b^2}{2}$. Ainsi, le rapport entre la force d'interaction et la tension de ligne s'exprime par :

$$\frac{F}{2\Gamma} = \frac{B}{\mu b^4}$$

La valeur de B dépend de la température. Blanc (1986) a calculé la valeur de B pour différents éléments dont le chrome et à différentes températures. à 600°C la valeur de B est égale à $1,65 \times 10^{-29} J.m$, et par conséquent $\frac{F}{2\Gamma} \sim 0,025$. Ce rapport ne peut pas être considérée comme faible, d'autant plus que le paramètre de Labusch $\beta = \frac{3\sqrt{3}}{32} \frac{\epsilon_a}{c}$ est égal à 0,072. Par conséquent, $\beta < 1$ et la statistique de Mott serait mieux adaptée pour décrire les interactions entre les dislocations et les atomes de chromes diffusants. La contrainte liée au durcissement par le DSA s'écrit alors :

$$\tau_{DSA} = f \mu C_s^{2/3} \quad \text{IV. 28}$$

Selon la formule de Mott (équation (IV.19), le facteur d'interaction f s'exprime sous la forme suivante :

$$f \cong 0,136 \epsilon_a^{4/3} \approx 0,004$$

Dans sa thèse, Patinet (2009) a étudié les interactions entre les dislocations coin et vis et les atomes de solutés dans une solution solide Al(Mg).

En considérant une extrapolation à température nulle (0K) des contraintes critiques expérimentales mesurées sur des monocristaux d'alliage Al(Mg) par Podkyuko and Pustovalov (1978), l'évolution de la contrainte critique résolue en fonction de la concentration Mg suit la loi de Mott (équation IV.19), comme le montre la figure FIG.IV-9.

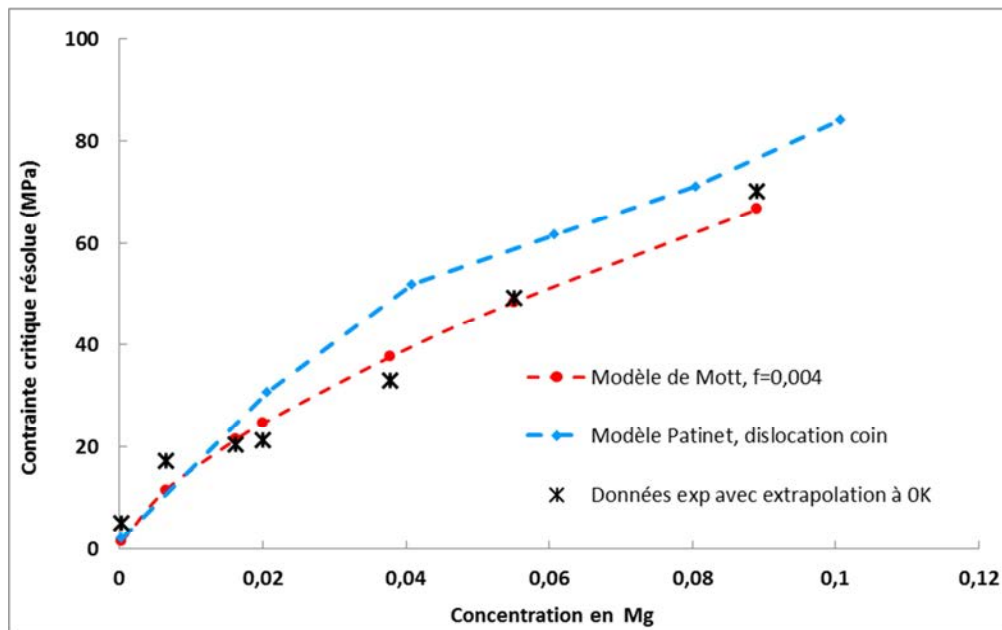


FIG. IV-9: évolution de la contrainte critique résolue à température nulle en fonction de la concentration en Mg dans une solution solide Al(Mg)

Comme on peut le constater sur la figure FIG.IV-9, le modèle de Mott décrit correctement l'évolution de la contrainte critique à température nulle en fonction de la concentration en Mg dans des monocristaux Al(Mg). Les simulations atomistiques réalisées par Patinet (2009) vont également dans ce sens et permettent de calculer un exposant du même ordre que celui utilisé dans la formule de Mott : 0,84 par simulation vs $2/3=0,67$ dans la formule de Mott.

Les interactions régissant le mécanisme du vieillissement dynamique à haute température sont différentes de celles décrites auparavant concernant le durcissement par solution solide (principalement actives à basse température). Par conséquent, la valeur du préfacteur f de l'équation (IV. 28) doit être différente de celle qui peut être calculée à partir de la formule IV. 19. De plus, les mesures expérimentales sur de nombreux matériaux (solution solide) montrent une influence notable de la température sur la contrainte critique résolue.

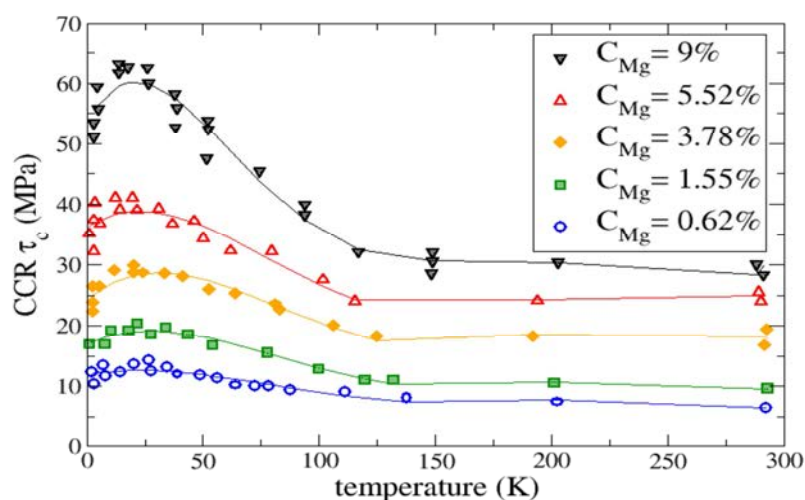


FIG. IV-10: évolution de la contrainte critique résolue en fonction de la température d'un alliage monocristallin Al(Mg) pour différentes concentrations en Mg (Podkyuko and Pustovalov, 1978).

Comme on peut le voir sur la figure FIG.IV-10, quelle que soit la concentration en Mg, la contrainte critique résolue diminue drastiquement lorsque la température augmente. Cette diminution est d'autant plus marquée lorsque la concentration en Mg est importante. Pour une solution solide contenant 9% de magnésium, la contrainte critique résolue est divisée par 2 pour des températures au-dessus de 150K. L'effet de la température sur la contrainte critique est également avéré dans d'autres alliages monocristallins : Cu(Al) (Butt and Feltham, 1977), Cd(Zn) et Cd(Ag) (Butt et al., 1980).

Ainsi, la formule de Mott permet d'avoir un ordre de grandeur du facteur f . toutefois, dans le cadre de l'étude, la valeur de ce facteur sera certainement moins importante comme nous nous intéressons aux interactions pour des températures élevées (entre 500°C et 600°C).

4. Schémas d'homogénéisation en elasto-visco-plasticité

Après avoir discuté des différents mécanismes microscopiques permettant de comprendre et de modéliser le comportement macroscopique des matériaux CFC et particulièrement de l'acier 316L(N) en fatigue et fatigue-relaxation à haute température, une étape fondamentale est de sélectionner une méthode d'homogénéisation permettant la transition de l'échelle microscopique à la réponse macroscopique. Dans cette partie, différents modèles à champs moyens ont été examinés par comparaison avec la méthode des éléments finis. Les lois cristallines adoptées dans cette démarche sont les mêmes que celles discutées dans le premier chapitre de ce manuscrit. Afin d'étudier l'effet de la viscosité, une loi d'écoulement viscoplastique est utilisée.

Les différents modèles d'homogénéisation ainsi que les lois cristallines seront décrits et leur validation sera discutée par comparaison aux résultats des calculs par éléments finis pour différents types de chargement.

4.1. Description des modèles d'homogénéisation adoptés

L'objectif de ce travail est de proposer un modèle permettant de décrire le comportement élasto-visco-plastique des aciers austénitiques inoxydables en fatigue et fatigue-relaxation à haute température. Dans ces conditions de chargement, les effets de viscoplasticité sont prépondérants avec notamment un effet important de la vitesse de chargement. Les modèles élastoplastiques ne seront plus en mesure de prédire correctement ces phénomènes et les lois de localisation viscoplastiques ou encore élastoviscoplastiques seraient mieux adaptées afin de mieux prendre en compte les accommodations viscoplastiques des interactions grain-matrice. Dans le cadre de cette étude de validation, trois schémas auto-cohérents ont été examinés : Kröner (déjà présenté dans le chapitre II), Molinari et Mercier-Molinari.

4.1.1. Modèle auto-cohérent viscoplastique de Molinari

Il s'agit d'un schéma auto-cohérent tangent que Molinari et al. (1987) ont proposé pour prédire le comportement viscoplastique des matériaux hétérogènes non-linéaires. La loi de localisation correspondant à ce schéma est obtenue par une linéarisation tangente du comportement mécanique aux deux échelles microscopique et macroscopique. L'élasticité n'est pas prise en compte dans ce modèle et le comportement du matériau est approximé par un développement de Taylor au premier ordre, en évitant l'approche incrémentale. En résolvant le problème d'inclusion d'Eshelby et en utilisant la technique des fonctions de Green, une loi d'interaction reliant les champs macroscopiques et microscopiques est obtenue :

$$\underline{\underline{s}} = \underline{\underline{S}} + \left[\underline{\underline{A}}^{tg} - \left(\underline{\underline{P}}^{tg} \right)^{-1} \right] : (\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp} - \underline{\underline{\dot{E}}}^{vp}) \quad (\text{IV-29})$$

$\underline{\underline{s}}$ et $\underline{\underline{S}}$ sont respectivement les tenseurs déviateurs des contraintes local (à l'échelle du grain) et macroscopique, $\underline{\underline{\dot{\epsilon}}}^{vp}$ et $\underline{\underline{\dot{E}}}^{vp}$ sont respectivement les tenseurs des vitesses de déformation local et macroscopique, $\underline{\underline{A}}^{tg}$ est le tenseur d'ordre 4 des modules macroscopiques tangents et $\underline{\underline{P}}^{tg}$ est un tenseur d'ordre 4 qui dépend des modules tangents et de la forme de l'inclusion.

4.1.2. Modèle élasto-viscoplastique de Mercier-Molinari :

Ce modèle a été proposé par Mercier et al. (2005) et constitue une généralisation du modèle de Molinari (1987) permettant de prédire le comportement élasto-viscoplastique des matériaux hétérogènes. Le schéma de l'homogénéisation adopté demeure alors le même en considérant une inclusion noyée dans une matrice homogène infinie. Les deux phases (inclusion et matrice) sont supposées élasto-viscoplastiques. Le tenseur de la vitesse de déformation totale est divisé en une

partie élastique et une partie viscoplastique (Mercier et al., 2005) et la loi de localisation permettant la transition de l'échelle locale à l'échelle macroscopique s'écrit sous la forme :

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{vp} - \underline{\dot{E}}^{vp} = \left(\underline{\underline{A}}^{tg} - \left(\underline{\underline{P}}^{tg} \right)^{-1} \right)^{-1} : (\underline{s} - \underline{S}) + \left(\underline{\underline{A}}^e - \left(\underline{\underline{P}}^e \right)^{-1} \right)^{-1} : (\underline{\dot{\sigma}} - \underline{\dot{\Sigma}}) \quad (IV-30)$$

Où $\underline{\underline{A}}^e$ est le tenseur d'ordre 4 des modules élastiques de la matrice, $\underline{\underline{A}}^{tg}$ le tenseur d'ordre 4 des modules tangents de la matrice (obtenu à partir de la loi d'écoulement viscoplastique) recherché. Le tenseur $\underline{\underline{P}}^e$ ($\underline{\underline{P}}^{tg}$) est calculé en intégrant les fonctions de Green liées au tenseur $\underline{\underline{A}}^e$ ($\underline{\underline{A}}^{tg}$) sur le volume de l'inclusion (d'où sa dépendance vis-à-vis de la forme de l'inclusion).

En regardant cette loi de localisation de plus près, on distingue deux termes : un terme viscoplastique (rigide) qui est similaire à la loi viscoplastique de Molinari (1987) et un terme élastique similaire à la loi thermoélastique proposée par Kröner (1961).

$$\underline{\dot{\epsilon}}^{vp} - \underline{\dot{E}}^{vp} = \underbrace{\left(\underline{\underline{A}}^{tg} - \left(\underline{\underline{P}}^{tg} \right)^{-1} \right)^{-1} : (\underline{s} - \underline{S})}_{\text{Partie viscoplastique Molinari}} + \underbrace{\left(\underline{\underline{A}}^e - \left(\underline{\underline{P}}^e \right)^{-1} \right)^{-1} : (\underline{\dot{\sigma}} - \underline{\dot{\Sigma}})}_{\text{Partie thermoélastique Kröner}}$$

Contrairement à la loi purement viscoplastique proposée par Molinari qui néglige l'élasticité, la construction de cette nouvelle loi d'interaction permet de prendre en compte le comportement élastique initial du matériau ainsi que la réponse viscoplastique à long terme. En effet, au début du chargement, les niveaux de contrainte sont relativement faibles tandis que les taux de contrainte sont importants. Ainsi, comme le terme viscoplastique est faible, la loi d'interaction peut se réduire au terme élastique et on se retrouve dans le cas d'une inclusion noyée dans une matrice élastique. Cette configuration correspond au modèle auto-cohérent de Kröner (1961). Au fur et à mesure que la déformation augmente, les taux de contraintes s'annulent progressivement et le comportement devient purement viscoplastique. Par conséquent, la loi d'interaction se résume au terme viscoplastique pur de Molinari.

4.2. Validation des modèles d'homogénéisation à champs moyen avec les calculs par EFs

4.2.1. Description du modèle cristallin

Afin de valider les schémas d'homogénéisation à champs moyens, un modèle cristallin a été adopté. La validation a été faite par comparaison avec des résultats de calculs par éléments finis. Les mêmes lois de plasticité cristalline et les mêmes paramètres ont été adoptés pour les différents types d'homogénéisation.

4.2.1.1. Lois cristallines

Les lois de plasticité cristalline sont définies sur chaque système de glissement i . La contrainte résolue sur chaque système de glissement est divisée en une contrainte isotrope τ_0 , supposée constante, et une contrainte cinématique non linéaire de type Armstrong-Frederick x_i :

$$\dot{x}_i = \frac{2}{3} A C \dot{\gamma}_i^{vp} - C x_i |\dot{\gamma}_i^{vp}|$$

A et C sont des paramètres matériau.

$\dot{\gamma}_i^{vp}$ est la vitesse du glissement viscoplastique sur le système i qui est reliée à la contrainte résolue sur ce même système grâce à la loi d'écoulement (cf. §III) :

$$\dot{\gamma}_i^{vp} = A' \sinh\left(\frac{\tau_i V}{kT}\right) \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right)$$

A' est une constante qui dépend de la densité des dislocation mobile et de la fréquence de Debye (cf. §III), k la constante de Boltzmann, T la température, V le volume d'activation et Q l'énergie d'activation.

Afin de simplifier notre démarche, tous les grains sont supposés orientés pour glissement simple (une seule population $R_{crit} = 1.1$) et le glissement secondaire est autorisé dans tous les grains ($q_s = 1.4$). Les paramètres utilisés correspondent à une identification sur des monocristaux d'acier austénitique 316L à une température de 600°C. Ces paramètres sont récapitulés dans le tableau TAB.IV-6.

Paramètre (unité)	Valeur
Module de Young E_y (MPa)	151000
Coefficient de poisson ν	0.33
T (K)	873
A (MPa)	22
C	15000
τ_0 (MPa)	30
A' (s ⁻¹)	$2 \cdot 10^{11}$
Q (ev)	3

TAB.IV-5: paramètres du modèle cristallin

4.2.1.2. Sensibilité des modèles aux paramètres numériques :

Pour les modèles à champs moyens, les différentes lois cristallines ainsi que les lois de localisation ont été implémentées sous forme de sous-routines dans le logiciel SiDoLo. Comme il a déjà été montré dans le chapitre II de ce manuscrit, seul le nombre de grains composant l'agrégat peut avoir un effet sur la stabilité de la réponse du modèle, chaque grain étant assimilé à une inclusion noyée dans une matrice homogène infinie. L'étude de sensibilité (Chapitre II) montre que 100 grains s'avèrent suffisants pour que la réponse prédite soit stable vis-à-vis du nombre de grains. Le pas de temps a été adapté suivant les conditions de chargement de manière à avoir une réponse stable également.

En ce qui concerne la méthode par éléments finis, les lois cristallines sont implémentées dans le logiciel CAST3M. Différents paramètres peuvent avoir un effet plus ou moins notable sur la stabilité numérique de la réponse prédite. Il s'agit principalement du nombre de grains constituant l'agrégat, le nombre d'éléments finis par grain, du type de maillage (cubique, polyèdres de Voronoi, vraie microstructure...), ainsi que du pas de temps. Dans son étude, Liu (2013) a montré que les courbes de traction prédites par la méthode EFs restent stables lorsque le nombre des grains ainsi que le nombre d'éléments finis par grains sont supérieurs à 100. Son étude a également révélé que le type de maillage (i.e représentativité de la microstructure) a peu d'effet sur la prédiction de la réponse macroscopique et qu'il n'influence pas non plus les distributions des champs de contraintes et de déformations. Ainsi, en s'appuyant sur les conclusions de Liu (2013) et afin de simplifier les calculs, un maillage cubique simple a été adopté dans cette étude. Un exemple de ce type de maillage est présenté sur la figure FIG.IV-11.

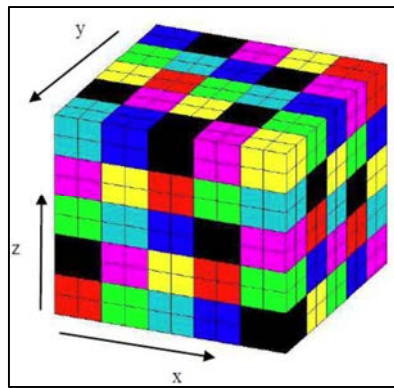


FIG. IV-11: Maillage cubique utilisé pour les calculs EFs

Afin de s'assurer de la stabilité de la prédiction du modèle cristallin avec la méthode EFs, une étude de sensibilité a été réalisée en faisant varier le nombre de grains, le nombre d'éléments finis par grains ainsi que le pas de temps. Les courbes de tractions prédites pour une vitesse de déformation totale de 10^{-5} s^{-1} sont présentées dans la figure FIG-IV.12. On constate que la réponse est indépendante des paramètres numériques tant que le nombre des grains et le nombre d'éléments finis par grains sont supérieurs ou égaux à 125. Le pas de temps choisi permet également une réponse stable. Toutefois, ce pas de temps est à adapter en fonction de la vitesse de chargement.

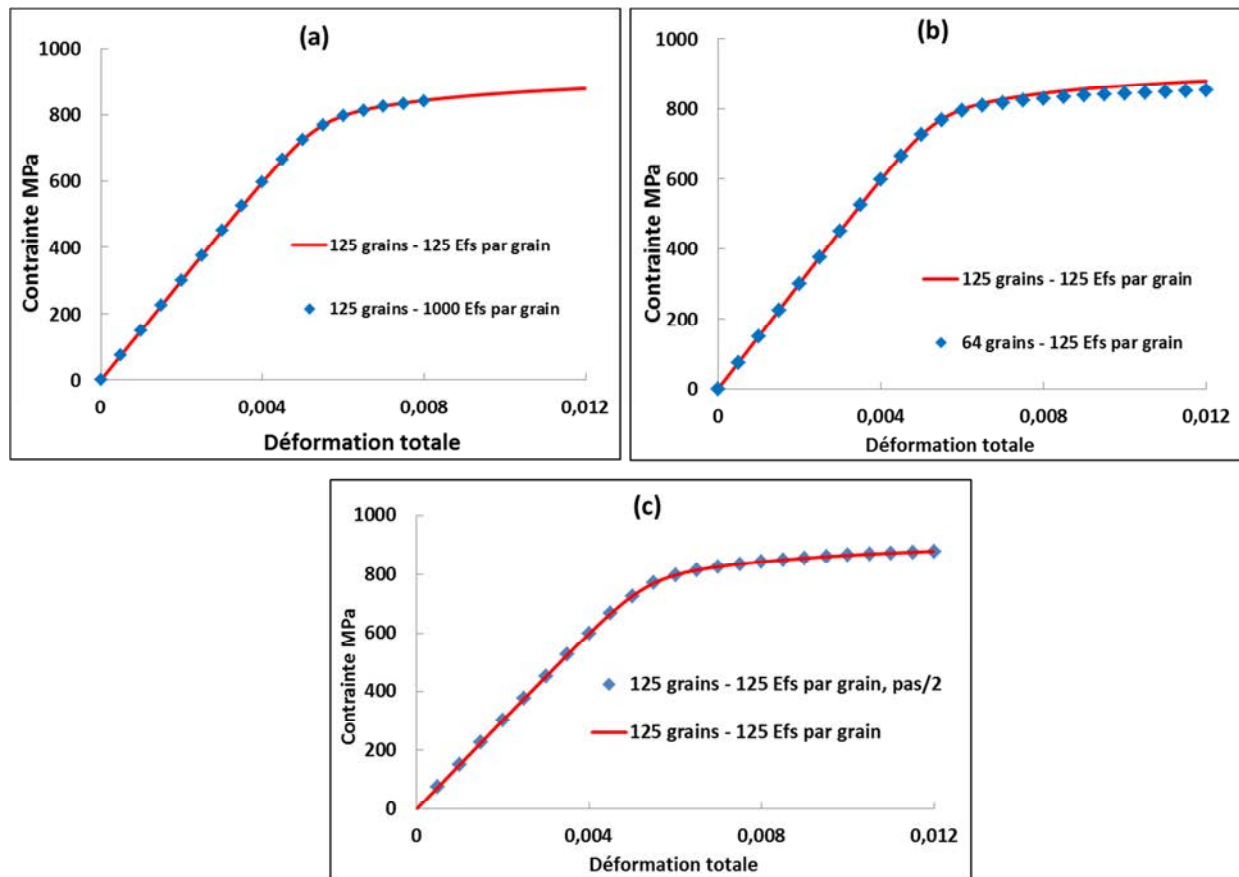


FIG. IV-12: effet des paramètres numériques sur la réponse en traction du modèle EFs (a) nombre d'éléments finis par grains (b) nombre de grains (c) pas de temps. $Q=3$ eV et $V=300$ b^3 .

4.2.2. Résultats

La validation des modèles à champs moyens a été examinée en faisant varier les paramètres de viscoplasticité (V et Q). Pour le volume d'activation, deux valeurs ont été étudiées : 30 b^3 et 300 b^3 , b étant le module du vecteur de Burgers. Ces valeurs correspondent à une viscosité importante (30 b^3) et faible (300 b^3). En ce qui concerne l'énergie d'activation Q une seule valeur a été étudiée (3 eV). Des problèmes de convergence n'ont pas permis d'étudier des valeurs plus faibles (1 eV). Différents types de chargement ont été appliqués (traction simple à différentes vitesses, relaxation). Les figures FIG.IV-13 et FIG.IV-14 présentent les courbes de traction prédites par les quatre modèles (Kröner, Molinari, Mercier-Molinari et la méthode EFs) avec un volume d'activation de 30 b^3 . Des problèmes de convergence ont été rencontrés avec le modèle de Mercier-Molinari et ce même avec le jeu de paramètres $Q=3$ eV et $V=30$ b^3 .

Avec un faible volume d'activation (30 b^3), on constate que les courbes de traction prédites par le modèle de Kröner sont assez proches de celles obtenues avec les calculs par éléments finis (EFs). L'accord est correct dans le cas du chargement avec une vitesse de 10^{-3} s^{-1} . En diminuant la vitesse du chargement, l'écart entre les deux prédictions augmente avec une surestimation de la contrainte de plus en plus importante avec le modèle de Kröner. L'écart relatif entre les contraintes calculées pour une déformation totale de $0,1\%$ est de l'ordre de 1% pour la vitesse 10^{-3} s^{-1} et de l'ordre de 7% pour

la vitesse 10^{-7} s^{-1} . On note que l'écart reste relativement faible ($<10\%$) et que le modèle de Kröner reproduit correctement les courbes calculées par EFs pour des déformations allant jusqu'à 8.10^{-3} .

En ce qui concerne le modèle viscoplastique de Molinari, il sous-estime largement la courbe macroscopique et ce quelle que soit la vitesse de chargement. L'accommodation viscoplastique se traduit par l'apparition rapide d'un plateau et un comportement beaucoup plus mou que celui prédit par les éléments finis.

Ces résultats sont en accord avec des calculs en plasticité parfaite (Sauzay et al., 2015). Le modèle de Molinari sous-estime largement le ratio entre la contrainte de traction macroscopique et la cisssion résolue moyenne. En effet, la loi de transition de Molinari donne un facteur de 2, inférieur à celui calculé par la méthode des éléments finis et par la méthode de transformation de Fourier rapide (FFT) (Lebensohn et al., 2005) qui est de l'ordre de 2,6 (Brenner, 2011). Le modèle de Kröner, surestime quant à lui ce facteur et donne une valeur égale au facteur de Taylor 3,06.

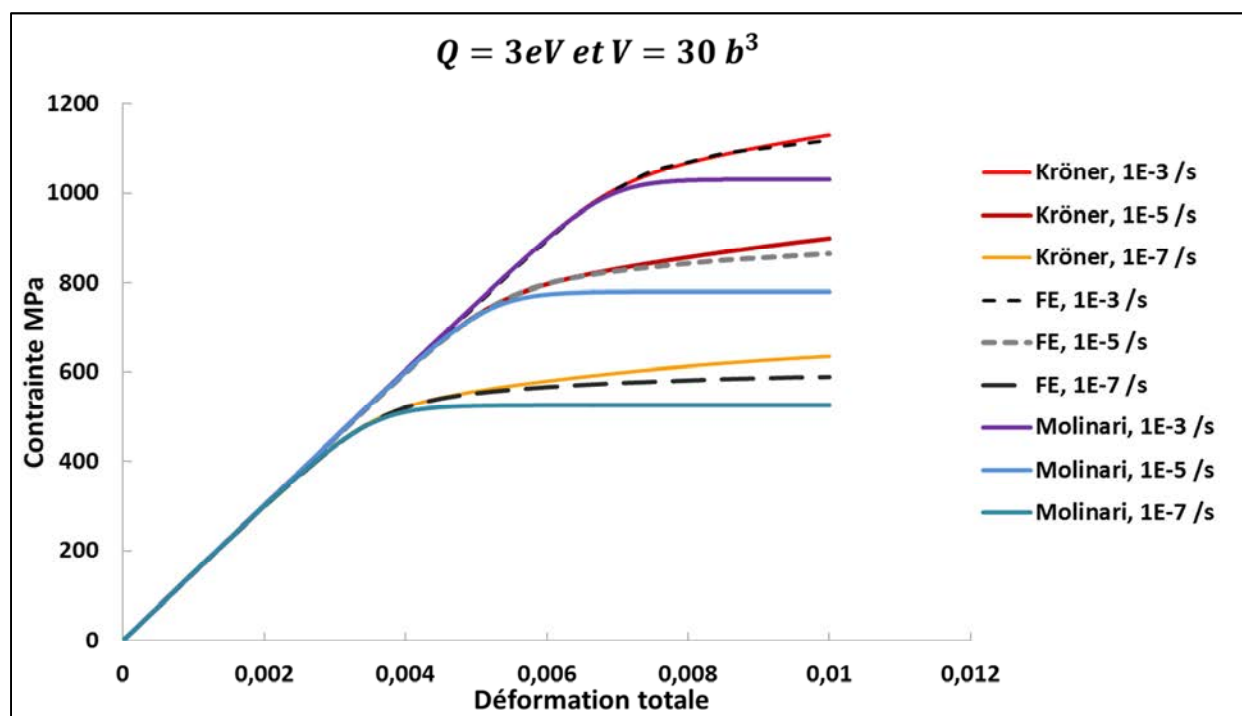


FIG. IV-13: courbes de traction prédites par les trois modèles (EFs, Kröner et Molinari) pour différentes vitesses de déformation avec le jeu de paramètres $Q=3eV$ et $V=30 b^3$

Enfin, la courbe de traction obtenue par la loi de localisation de Mercier-Molinari pour une vitesse de déformation totale de 10^{-5} s^{-1} est présentée sur la figure FIG.IV-14. Celles prédites par les modèles de Kröner, Molinair et EFs sont également présentées pour comparaison. On remarque que le modèle de Mercier-Molinari sous-estime à son tour le comportement macroscopique, comparé aux EFs. Au début du domaine plastique on note que la courbe de Mercier-Molinari est très proche de celle de Kröner. Ceci est en accord avec la construction même de la loi élasto-visco-plastique. Dans ce domaine transitoire, les niveaux de contraintes sont relativement faibles tandis que les vitesses de déformations sont élevées. Ainsi le terme viscoplastique est faible et le terme élastique est

prépondérant (terme de Kröner). Ce régime est néanmoins très court et la courbe prédite tend rapidement vers celle obtenue avec le modèle viscoplastique pur (Molinari). Numériquement nous retrouvons bien que le second terme de la loi de Mercier-Molinari (terme de Kröner) devient rapidement petit devant le premier terme (Molinari). Ceci explique la proximité entre les courbes prédites par le modèle de Molinari d'une part et de Mercier-Molinari de l'autre.

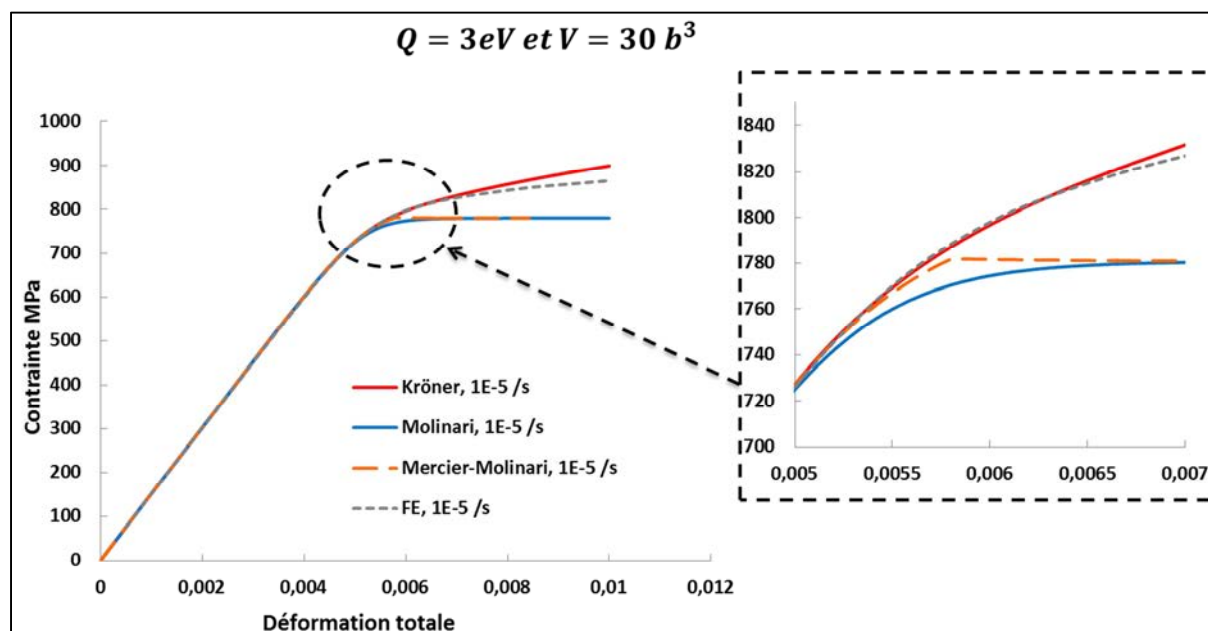


FIG. IV-14: courbes de tractions prédites par les quatre modèles (EFs, Kröner, Molinari et Mercier-Molinari) pour une vitesse de chargement de 10^{-5} s^{-1} et un volume d'activation $V=30 b^3$

Les courbes de traction prédites par les trois modèles (Kröner, EFs et Molinari) en utilisant un fort volume d'activation ($V=300 b^3$) sont présentées sur la figure FIG.IV-15. Ce volume d'activation correspond à une viscosité plus faible que précédemment. A cause de difficultés de convergence avec les deux lois de localisation viscoplastique et élasto-visco-plastique, seule la courbe de traction correspondant à la vitesse 10^{-3} s^{-1} a pu être calculée avec le modèle de Molinari. On note néanmoins que ce dernier sous-estime largement la réponse macroscopique en comparaison avec la courbe obtenue par EFs. Le modèle de Kröner permet encore une fois un meilleur accord avec la méthode EFs et ce pour les deux vitesses étudiées, notamment aux faibles déformations.

Notons que dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons au domaine des faibles déformations en fatigue-relaxation, correspondant au chargement en service auquel seront soumis les composants. Pour une déformation totale de 0.2%, l'écart relatif entre les contraintes calculées par les deux modèles, Kröner et EFs, est inférieur à 7%. Cet écart demeure limité et l'utilisation du modèle de Kröner serait donc justifiée.

L'écart relatif entre les contraintes prédites par les deux approches, Kröner et EFs, est de plus en plus important lorsque la déformation augmente. Il est de l'ordre de 11% pour les deux vitesses à 1% de déformation totale. Notons aussi que pour des volumes d'activation élevés ($V=300 b^3$), nous nous rapprochons du domaine de l'élastoplasticité. Le résultat constaté ici est en accord avec l'étude

menée dans le chapitre II mettant en évidence une surestimation des niveaux des contraintes prédites par le modèle de Kröner en élastoplasticité, aussi bien en traction qu'en fatigue pure à température ambiante.

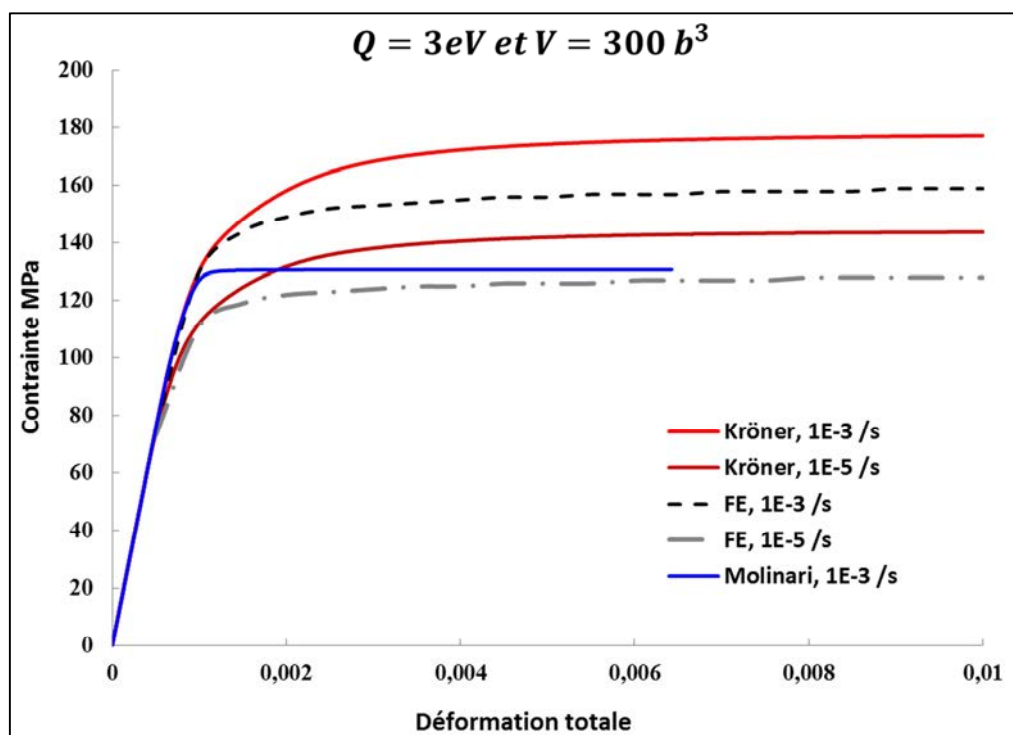


FIG. IV-15: courbes de traction prédites par les modèles de Kröner, de Molinari et par la méthode EFs avec un volume d'activation de $300 b^3$

La comparaison des courbes de traction prédites par les différents modèles et avec deux volumes d'activation différents ont permis d'exclure les deux schémas d'homogénéisation viscoplastique et élasto-visco-plastique présélectionnés. En effet, ces deux modèles sous-estiment considérablement la réponse macroscopique. Bien que la loi d'interaction proposée par Mercier et al. (2005) prenne en compte les interactions purement élastiques entre les grains et la matrice au début de la déformation, ce régime reste transitoire et très court et le modèle tend rapidement vers celui proposé par Molinari (1987). Les accommodations viscoplastiques induisent une réponse très molle. En outre, Le modèle de Kröner s'avère le mieux adapté en permettant des prédictions assez proches de celles obtenues par la méthode des EFs. L'écart entre les deux méthodes demeure limité et inférieur à 10%. En plus des courbes de traction, les deux modèles (Kröner et EFs) ont été utilisés pour prédire des courbes de relaxation (FIG.IV-16). Là encore, les prédictions du schéma auto-cohérent de Kröner sont en bon accord avec les calculs par éléments finis et ce même pour des relaxations assez longues (de l'ordre de 1 mois après une montée en charge à vitesse de $10^{-7} s^{-1}$ jusqu'à une déformation totale de 0,65%).

Dans le cadre de cette étude, nous nous intéressons aux domaines des faibles déformations, proches des sollicitations en service (0.2 à 0.3%). Le choix du modèle de Kröner est par conséquent justifié. Cependant, d'autres modèles élasto-visco-plastiques à champs moyens (Mareau et al., 2009) sont à investiguer et à comparer avec les calculs par éléments finis dans l'optique de se doter d'un seul

modèle capable de prédire le comportement des métaux et alliages CFC même à grande déformation, ce qui n'est pas le cas du modèle de Kröner.

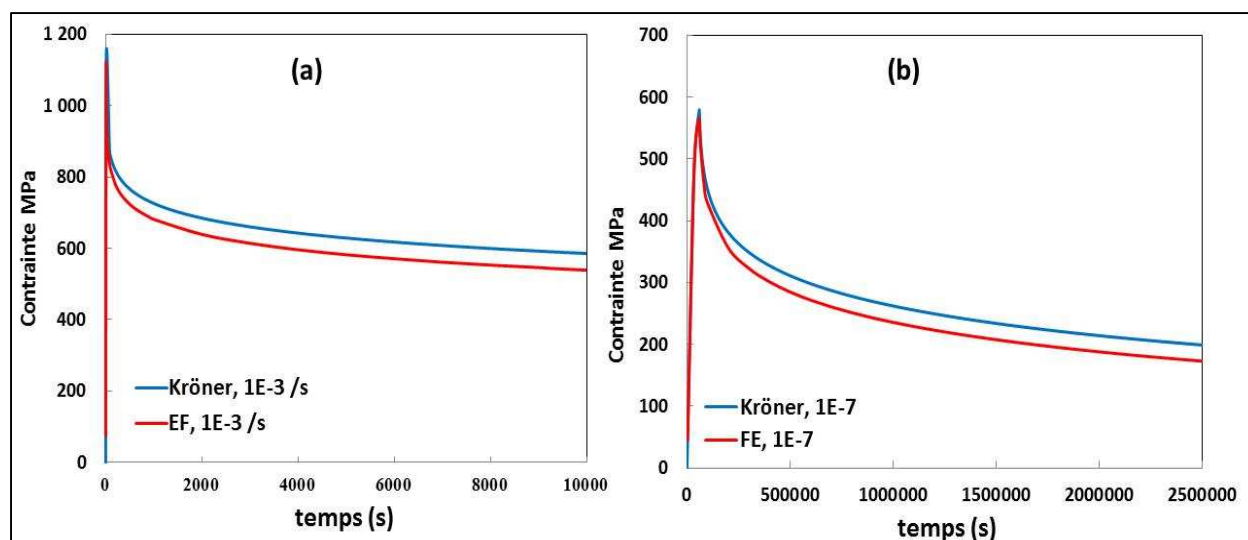


FIG. IV-16: Courbes de relaxation prédites par le modèle de Kröner et la méthode EFs pour un volume d'activation de 30 b^3 . (a) pour une vitesse de montée en charge de 10^{-3} s^{-1} (b) vitesse de montée en charge de 10^{-7} s^{-1}

5. Conclusions

L'objectif de cette partie a été d'identifier les différents mécanismes caractérisant le comportement mécanique de l'acier 316LN en fatigue-relaxation à haute température. Les mécanismes de restauration sont décrits et un modèle basé sur la montée des dipôles lors du maintien (en relaxation ou en fluage) est proposé. Le modèle permet de prédire correctement le temps de maintien critique nécessaire pour obtenir une microstructure homogène et à la disparition de phases dipolaires. Ensuite, une revue bibliographique des différents modèles permettant de décrire les interactions entre dislocations mobiles et atomes de soluté a permis d'identifier un modèle de durcissement liée au vieillissement dynamique. Enfin, la validité de différents modèles à champs moyens a été étudiée par comparaison avec les calculs par éléments finis. A l'issue de cette étude, la loi de transition thermoélastique proposée par Kröner semble être celle qui permet le meilleur accord avec les résultats obtenus par EFs.

6. Références

- Blanc, D., 1986. Thèse de Doctorat en Sciences et génie des matériaux, ENSMP.
- Brenner, R., 2001. Thèse de doctorat, Université Paris 13.
- Butt, M. Z., Ghauri, I. M., Qamar, R., Hashmi, K. M., Feltham, P., 1980. *Acta Metallurgica*, vol. 29, p. 829.
- Butt, M. Z., Feltham, P., 1978. *Acta Metallurgica*, vol. 26, p. 167.
- Caillard, D., Martin, J.-L., 2003. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Pergamon Materials Series.
- Catalao, S., X. Feaugas, Ph Pilvin et M. Th Cabrillat. 2005. *Materials Science and Engineering A*. vol. 400, p. 349.
- Choudhary, B. K., 2014. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 603, p. 160.
- Cottrell, A. H., Bilby, B. A., 1949. *Proc. Phys. Soc. A*62, p. 49.
- Cottrell, A. H., 1948. *Rep. Conf. Strength of Solids (Bristol 1947)*, Phys. Soc. London.
- Differt, K., Essmann, U., 1993. *Mat. Sci. and Eng.*, vol. 164, p. 295.
- Eshelby, J. D., 1957. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, vol. 241, p. 376.
- Feaugas, X., Catalao, S., Pilvin, P., Cabrillat, M., 2008. *Mat. Sci. and Eng. A*, vol. 483, p. 422.
- François, D., Pineau, A., Zaoui, A.. *Comportement mécanique des matériaux (Elasticité et plasticité)*. Hermes, 1995.
- Friedel, J., 1963. The relation between structure and mechanical properties of metals. *Proc. Conf. at N.P.L.*, 15 :410.
- Friedel, J., 1964. *Dislocations*. Addison-Wesley, New York.
- Gerland, M., Alain, R., Ait Saadi, B., and Mendez, J., 1997. *Materials Science and Engineering*, vol. 229, p. 68.
- Gentet, D., 2009. Thèse de Doctorat, Université de La Rochelle.
- Hirth, J. P., Lothe, J., 1991. *Theory of Dislocations*, 2nd New edition.
- Heumann, Th., 1968. *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 29, p. 1613.
- Hirth, J.P., Lothe, J., 1982. *Theory of dislocations*. Wiley Interscience, New York.
- Kröner, E., 1961. Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metall.* 9, 155–161.
- Lemaitre, J., Chaboche, J.-L., 1988. *Mécanique des matériaux solides*, Dunod.
- Lebensohn, RA, Castelnau, O., Brenner, R., Gilormini, R., 2005. *Int. J. Sol. Struct.* Vol. 42, p. 5441.
- Louat, N., 1981. On the theory of the Portevin–Le Chatelier effect. *Scripta Metallurgica*, vol. 15, p. 1167–1170.
- Mareau, C., Favier, V., Berveiller, M., 2009. *Int J Sol Struct*, vol 46, p. 223-237.
- Martin, J.-L., 2000. *Dislocations et plasticité des cristaux*. Cahiers de physique. Presses polytechniques et universitaires romandes.
- McCormick, P., 1972. A model for the Portevin–Le Chatelier effect in substitutional alloy. *Acta Met.*, vol. 20, p. 351–354.
- McCormick, P., 1988. Theory of flow localisation due to dynamic strain ageing. *Acta Met.*, vol. 36, p. 3061–3067.
- Mercier, S., Jacques, N., Molinari, A., 2005. Validation of an interaction law for the Eshelby inclusion problem in elastoviscoplasticity. *Int. J. Solids Struct.* 42, 1923–1941.
- Molinari, A., Canova, G.R., Ahzi, S., 1987. A self consistent approach of the large deformation polycrystal plasticity. *Acta Metall.*, vol. 35, p. 2983–2994.
- Mott, N. F., 1952. *Imperfections in Nearly Perfect Crystals*. John Wiley, New York.
- Mulford, R. and Kocks, U., 1979. New observations on the mechanisms of dynamic strain aging and of jerky flow. *Acta Met.*, vol. 27, p. 1125–1134.
- Nouailhas, D., 1989. *International Journal of Plasticity*, vol. 5, p. 501.
- Patinet, S., 2009. These de Doctorat, Université Paris-Sud XI.
- Prinz, F., Argon, A. S., Moffat, W. C., 1982. *Acta Metall.*, vol. 30, p. 821.
- Rezgui, B., 1982. Thèse de Doctorat, Paris XI, Orsay.

- Sauzay, M., Mottot, M., Allais, L., Noblecourt, M., Monnet, I., Périnet, J., 2004. Nuclear Engineering and Design, vol. 232, p. 219.
- Sauzay, M., Liu, J., Rachdi, F., Signor, L., Ghidossi, Th., Villechaise, P., 2015. Accepted abstract for the 9th European Solid Mechanics Conference (ESMC 2015). July 6-10, 2015, Leganés-Madrid, Spain.
- Sleeswyk, A., 1958. Slow strain hardening of lingot iron. Acta Met., vol. 6, p. 598–603.
- Srinivasana, V.S., Valsana, M., Sandhyaa, R., Bhanu Sankara Raoa, K., Mannana, S.L., Sastryb, D.H., 1999. International Journal of Fatigue, vol. 21, p. 11.
- Suzuki, H., 1957. Dislocations and Mechanical Properties of Crystals. Wiley, New York.
- Suzuki, T., Takeuchi, S., Yoshinaga, H., 1991. Dislocation Dynamics and Plasticity. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 32.
- Tavassoli, A.A., 1986. Phil. Mag. A, vol. 54, p. 521.
- Tippelt, B., Bretschneider, J., Hahner, P., 1997. Phys. Stat. Sol., vol. 163, p. 11.
- Turunen, M. J., 1976. Acta Metall., vol. 24, p. 463.
- van den Beukel, A. (1975). Theory of the effect of dynamic strain aging on mechanical properties. Acta Met., vol. 30, p. 197–206.

V. Modèle polycristallin en fatigue-relaxation

1. Introduction

Les chapitres précédents ont permis d'identifier l'ensemble des mécanismes à prendre en compte dans la modélisation du comportement mécanique en fatigue-relaxation. En fin de thèse, l'ensemble des équations a été implémenté dans le logiciel SiDoLo permettant de décrire les différents mécanismes, à savoir : la viscoplasticité, la production et l'annihilation des dislocations par glissement, l'annihilation par montée ainsi que le vieillissement dynamique. La première partie de ce chapitre récapitule les différentes équations du modèle. Dans la seconde partie est abordée la démarche d'identification des trois paramètres du modèle qui demeurent difficile à évaluer directement : le volume et l'énergie d'activation et le pré-facteur lié au vieillissement dynamique. Enfin, les différents résultats obtenus sont présentés et discutés.

2. Description du modèle (récapitulatif)

L'ensemble des lois permettant de décrire l'évolution des différentes populations de dislocations (coin, vis et dipôles) ont été présentées dans le chapitre III, dans lequel seuls les mécanismes actifs à température ambiante ont été introduits. Afin de pouvoir se doter d'un modèle représentatif des différents phénomènes mis en évidence expérimentalement au cours des chargements combinant la fatigue et la relaxation (et/ou fluage) à haute température, les lois de montée des dipôles coin et celles décrivant le vieillissement dynamique ont été introduites. Ces derniers mécanismes ont été discutés dans le chapitre IV.

Dans cette partie, l'ensemble des lois cristallines sont récapitulées. Ces lois ont été définies sur chaque système de glissement pour une structure cubique à faces centrées.

Une des particularités du présent modèle réside dans le couplage entre le glissement des dislocations coin et celui des dislocations vis. De plus, dans le cas d'un chargement cyclique, la contrainte résolue appliquée sur un système de glissement donné change de signe au cours d'un cycle (passage de la traction à la compression). Ceci induit une variation du signe du glissement et donc du terme de production des dislocations (Giroux, 2010). Dans le cadre de cette étude, nous supposons dans un premier temps une réversibilité totale dans le développement (bowing-out) et la constriction (bowing-in) des boucles de dislocations. Ceci se traduit par la multiplication du terme de production (pour les dislocations coin et vis) par le signe du rapport $\frac{\dot{\gamma}^p}{\gamma^p}$. En fin de chapitre, nous reviendrons sur l'hypothèse d'irréversibilité.

Ces lois s'expriment alors, sur chaque système de glissement $i=1, 12$, par les formules suivantes :

- Dislocations coins :

$$\dot{\rho}_{i,e} = \frac{2}{b L_f} \text{sign} \left(\frac{\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}}{\gamma_{i,s}^{vp}} \right) \dot{\gamma}_{i,s}^{vp} - 2 \frac{\gamma_e}{b} \rho_{i,e} |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| - \dot{\rho}_{i,d}^+ \quad (\text{V.1})$$

- Dislocations vis:

$$\dot{\rho}_{i,s} = \frac{2}{b L_f} \text{sign} \left(\frac{\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}}{\gamma_{i,e}^{vp}} \right) \dot{\gamma}_{i,e}^{vp} - 2 \frac{\gamma_e}{b} \rho_{i,s} |\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \quad (\text{V.2})$$

- Libre parcours moyen :

$$L_f = \min(d, \frac{k}{\sqrt{\rho_t}}) \quad (\text{V.3})$$

- Dipôles :

$$\dot{\rho}_{i,d} = 2\rho_{i,e} \frac{h_{max}-y_e}{b} |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}| - 2 \frac{y_e}{b} \rho_{i,d} \dot{\gamma}_{i,e}^{vp} - \frac{\rho_{i,d}}{t_{cl}} \quad (\text{V.4})$$

$$\text{avec } \dot{\rho}_{i,d}^+ = 2\rho_{i,e} \frac{h_{max}-y_e}{b} |\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}|$$

- Temps de montée :

$$t_{cl} \approx \frac{\mu k T}{32 \pi^2 D^{(sd)} (\tau_{cl})^2 b} \quad (\text{V.5})$$

- Coefficient d'auto-diffusion :

$$D^{(sd)} = D_0 \exp\left(-\frac{Q^{sd}}{RT}\right) \quad (\text{V.6})$$

- Lois d'écoulement viscoplastiques pour les dislocations coin et vis :

$$\dot{\gamma}_{i,e}^{vp} = 2v_D b^2 \rho_{i,e} \exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh \frac{|\tau_i - \tau_{\mu}^i| V}{kT} \quad (\text{V.7})$$

$$\dot{\gamma}_{i,s}^{vp} = 2v_D b^2 \rho_{i,s} \exp\left(\frac{\Delta G_0}{kT}\right) \sinh \frac{|\tau_i - \tau_{\mu}^i| V}{kT} \quad (\text{V.8})$$

- Loi régissant l'évolution de l'écrouissage dit « isotrope » :

$$\tau_{\mu}^i = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^{12} h_{ij} \rho^j} + \tau_{DSA}^i \quad (\text{V.9})$$

- Contrainte liée au vieillissement dynamique (voir III.2) :

$$\tau_{DSA}^i = f \mu C_s^i \quad (\text{V.10})$$

$$C_s^i = c_{sat} \left(1 - \exp\left(-\frac{c_0}{c_{sat}} \left(\frac{t_{a,i}}{\delta}\right)^{\frac{2}{3}}\right) \right) \quad (\text{V.11})$$

$$c_{sat} = \frac{c_0}{c_0 + \exp\left(-\frac{B C_r}{b k T}\right)} \quad (\text{V.12})$$

$$\delta = \left(\frac{2c_{sat}}{3c_0}\right)^{3/2} \frac{k T b^3}{2 B D_{Cr}} \quad (\text{V.13})$$

$$D_{Cr} = D_0^{Cr} \exp\left(-\frac{Q_{Cr}}{RT}\right) \quad (\text{V.14})$$

- Temps de vieillissement $t_{a,i}$:

$$\frac{dt_{a,i}}{dt} = 1 - \frac{t_{a,i}}{t_{w,i}} \quad (\text{V.15})$$

Avec $t_{w,i}$: le temps d'attente de la dislocation au niveau de l'obstacle. Nous faisons l'hypothèse que les obstacles sont les arbres de forêt. Par conséquent, le temps d'attente s'exprime sur chaque système de glissement par la formule suivante :

$$t_{w,i} = \frac{(\rho_{i,e} + \rho_{i,s}) \times b}{|\dot{\gamma}_{i,e}^{vp} + \dot{\gamma}_{i,s}^{vp}| \times \sqrt{\rho_t}} \quad (\text{V.16})$$

Comme il a été montré à la fin du chapitre IV, la loi de transition d'échelle proposée par Kröner semble être la plus à même de prédire le comportement macroscopique comparé aux calculs par éléments finis sur agrégats polycristallins pour les jeux de paramètres viscoplastiques considérés. Ainsi, dans notre modèle, le passage de l'échelle locale (celle du grain/monocristal) à l'échelle macroscopique est assuré grâce à la loi de Kröner s'exprimant sous la forme :

$$\underline{\Sigma} = \underline{\sigma} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{E}^{vp} - \underline{\varepsilon}^{vp}) \text{ avec } \beta = \frac{2(4-5\mu)}{15(1-\mu)} \quad (\text{V.17})$$

3. Identification des paramètres

Les différentes lois implémentées dans le modèle font appel à un certain nombre de paramètres dont la majorité sont des paramètres physiques caractéristiques du matériau et disponibles dans la littérature. Nous notons également que seuls trois paramètres restent à identifier, à savoir le volume d'activation, V , l'énergie d'activation, Q , et le pré-facteur de la contrainte critique liée au phénomène de DSA, f . Différents obstacles pouvant coexister dans ces alliages (dislocations, clusters d'atomes de solution solide, atmosphère d'atomes de Cr), il est malaisé de faire un choix à priori, ce qui rend difficile l'évaluation du facteur f .

3.1. Paramètres physiques et expérimentaux :

Comme il a été montré au chapitre III, la distance critique y_s peut être reliée à la contrainte τ_{III} (équation III.22), la contrainte seuil pour l'activation thermique de l'annihilation des dislocations vis par cross-slip. Cette contrainte dépend de la température. Bonneville et al. (1988) ont en effet établi une loi linéaire empirique reliant la contrainte τ_{III} à la température, Déprès (2004) l'a simplifié et adapté à l'acier 316L sous la forme :

$$\tau_{III} = \mu(7.78 - 0.002823 \times T) \cdot 10^{-4} \quad (\text{V.18})$$

En ce qui concerne la concentration à saturation en soluté, Louat (1981) propose la relation suivante :

$$C_{sat} = \frac{C_0}{C_0 + \exp\left(-\frac{B_{Cr}}{bkT}\right)} \quad (\text{V.19})$$

Les essais de traction à différentes vitesses sont la base expérimentale de cette identification. Ces essais ont été réalisés à 600°C et par conséquent les valeurs des paramètres dépendant de la température seront donc celles correspondant à 600°C.

Des essais de traction à 600°C avec sauts de vitesses ont également été réalisés. Les vitesses investiguées variaient entre 10^{-8} s^{-1} et 10^{-5} s^{-1} . Malheureusement, les variations de la contrainte mesurées lors des sauts de vitesse sont faibles et difficilement exploitables pour cette identification (de l'ordre du bruit de mesure).

Le tableau TAB.V-1 récapitule les paramètres physiques du modèle, ce sont des constantes indépendantes de la température.

Paramètre	Nom	Valeur (unité)	Référence
k	Constante de Boltzmann	$1,38.10^{-23} [\text{J.K}^{-1}]$	(François et al., 1993)
R	Constante des gaz parfaits	$8,314 [\text{J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}]$	(François et al., 1993)
D_0	Coefficient d'autodiffusion des lacunes	$5.10^{-5} [\text{m}^2.\text{s}^{-1}]$	(Heumann, 1968)
Q_{sd}	Energie d'autodiffusion des lacunes	$280 [\text{KJ.mol}^{-1}]$	(Heumann, 1968)
D_0^{Cr}	Coefficient de diffusion du Chrome	$1,3. 10^{-5} [\text{m}^2.\text{s}^{-1}]$	(Perkins et al., 1973)
Q_{Cr}	Energie de diffusion du Chrome	$264 [\text{KJ.mol}^{-1}]$	(Perkins et al., 1973)
ν_D	Fréquence de Debye	$10^{13} (\text{s}^{-1})$	(Caillard and Martin, 2003)
B_{Cr}	Energie d'interaction Fer-Chrome	$1,63.10^{-26} [\text{J.m}]$	(Blanc, 1986)

TAB.V-1 : Paramètres indépendants de la température.

Les autres paramètres concernant des paramètres matériau sont spécifiques à l'acier austénitique 316LN à 600°C. Outre les valeurs issues directement de valeurs expérimentales disponibles dans la littérature, la distance critique γ_s (équations III.22 et V.18) et la concentration à saturation C_{sat} (équation V.19) ont été calculées.

Les valeurs de ces paramètres sont regroupées dans le tableau TAB.V-2.

Paramètre	Nom	Valeur (unité)	Référence
μ	Module élastique de cisaillement	58 [GPa]	
b	Module du vecteur de Burgers	$2,56.10^{-10}$ [m]	(François et al., 1993)
ν	Coefficient de Poisson	0,3 [-]	(François et al., 1993)
γ_e	Distance d'annihilation des dislocations coins	4,4 [nm]	(Catalao et al., 2005)
γ_s	Distance d'annihilation des dislocations vis	72,25 [nm]	(Bonneville et al., 1988) et (Deprès, 2004)
C_0	Concentration nominale en chrome	0,17 [-]	
C_{sat}	Concentration à saturation en chrome autour d'une dislocation	0,53 [-]	Eq. V.19

TAB.V-2 : Paramètres matériau, 316LN à 600°C

3.2. Identification des paramètres V, Q et f :

L'ensemble des équations du modèle a été introduit dans le logiciel de simulation SiDoLo (SiDoLo, 2000) sous forme de sous-routines en Fortran. L'identification du jeu de paramètre (V, Q, f) a été effectuée en simulant les essais de traction à 600°C avec différentes vitesses de déformation. Ces essais ont été décrits dans le chapitre I de ce manuscrit. Les trois paramètres ont été identifiés de manière à prendre en compte l'effet de la viscosité plastique aux faibles vitesses de déformation (trainage des atomes de soluté par les dislocations en mouvement), l'effet inverse de la vitesse liée aux interactions entre les atomes de soluté et les dislocations mobile (DSA) et enfin l'effet « traditionnel » de la vitesse liée à la friction.

Notons que dans notre cas, nous avons utilisé les courbes de traction à différentes vitesses de déformation pour identifier ces paramètres. Des essais de traction avec sauts de vitesses ont été réalisés à 600°C mais les résultats n'ont pas pu être exploités. Ce type d'essai a par exemple été utilisé par Viguié et al. (2015) afin d'identifier un modèle de viscoplasticité permettant la prédiction des courbes de fluage pour un alliage Ti-6Al-4V. D'autres types d'essais peuvent également être proposés dans le cadre de cette identification comme des relaxations successives (Caillard et Martin, 2008).

Le jeu de paramètres optimal est celui permettant une meilleure approximation des courbes expérimentales. Les valeurs des paramètres identifiés dans notre cas sont présentées dans le tableau TAB.V-3.

Paramètre (unité)	V (b ³)	Q (ev)	f (-)
Valeur	280	2.6	0.001

TAB.V-3: valeurs des paramètres identifiés

La valeur du volume d'activation identifiée est identique à celle rapporté par Feaugas (1999), correspondant à l'activation du glissement dévié. Gentet (2009) identifie à partir de courbes de relaxation un volume d'activation apparent de l'ordre de 250 b³ en l'attribuant également à l'activation du glissement dévié. Néanmoins, l'énergie d'activation du glissement dévié rapportée par Feaugas (1999) est de l'ordre de 1,2 ev, 2 fois plus faible que l'énergie d'activation identifiée.

L'énergie d'activation de la diffusion du chrome dans l'austénite varie entre 243 et 264 KJ/mol (Gentet, 2009) et par conséquent entre 2,5 et 2,73 ev. L'énergie d'activation identifiée est très proche de ces valeurs et pourrait donc correspondre à l'énergie d'activation des interactions entre les dislocations et les nuages de solutés (vieillissement dynamique), en l'occurrence avec des atomes de chrome.

Ces paramètres d'activation pourraient également correspondre aux interactions entre les dislocations mobiles et les arbres de forêts. François et al. (2009) rapportent un volume d'activation de l'ordre de 100b³ et une énergie d'activation variant entre 1,27 et 6,3 ev. L'intervalle de variation de l'énergie d'activation est relativement large ce qui ne permet pas de conclure. Le volume d'activation identifié est 2,8 fois plus élevé que celui indiqué par François et al. (2009).

Le pré-facteur f identifié est inférieur à celui issu du modèle théorique de Mott ($f \cong 0,004$). Toutefois, la statistique de Mott a été obtenue dans le cadre d'un durcissement par solution solide et ne prend pas en compte l'activation thermique à haute température de l'extraction des dislocations des nuages d'impuretés (Cr). Comme il a été montré dans le chapitre IV de ce manuscrit, la contrainte critique résolue diminue fortement avec la température. On peut supposer qu'il en est de même pour le pré-facteur f qui décrit le durcissement lié aux interactions entre dislocations et atomes de soluté. Ajoutons que les dislocations sont décomposées en deux partielles très éloignées dans l'acier 316LN, ce qui n'est pas pris en compte dans l'évaluation de la force d'ancrage théorique.

Enfin, dans cette étude, et pour éviter des problèmes de convergence, un modèle linéaire a été adopté afin de décrire la relation entre la contrainte critique et la concentration au voisinage de la dislocation. La figure FIG.V-1 présente l'évolution de la contrainte τ_{DSA} en fonction de la concentration en chrome, obtenue par le modèle linéaire et par la formule de Mott (en utilisant $f \cong 0,001$).

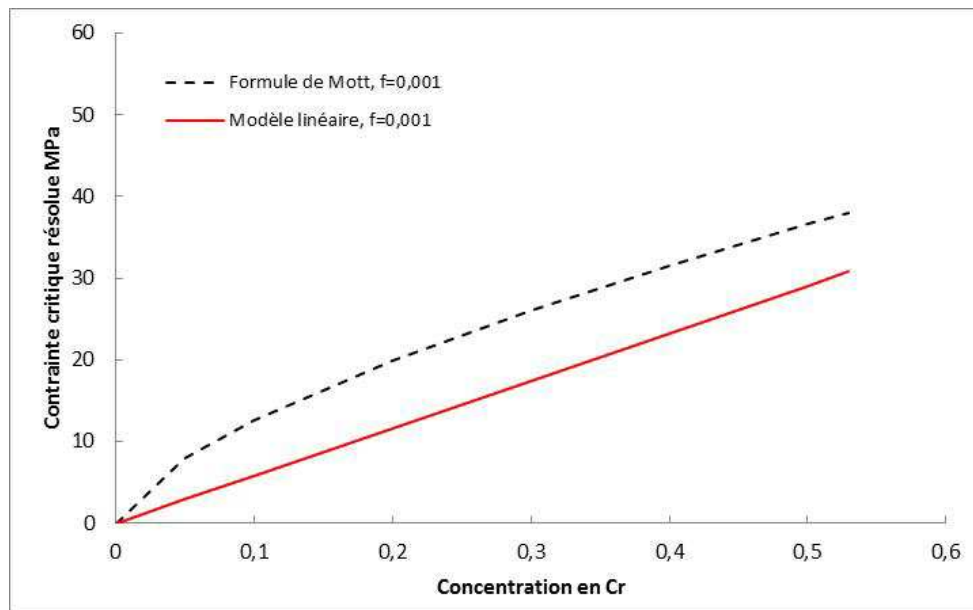


FIG. V-1: Evolution de la contrainte critique liée au DSA obtenue par la formule de Mott et par la formule linéaire pour l'acier 316LN, $f=0,001$

La figure FIG.V-2 présente les courbes obtenues par le modèle avec le jeu de coefficients correspondant à un optimum pour l'ensemble des phénomènes pris en compte. Les courbes expérimentales utilisées pour l'identification sont également tracées pour comparaison. Il s'agit de courbes de traction monotone à 600°C avec différentes vitesses de déformation totale : $2 \cdot 10^{-3}$, $2 \cdot 10^{-5}$, $2 \cdot 10^{-7}$ et $2,5 \cdot 10^{-8} \text{ s}^{-1}$.

On peut noter que les courbes prédites par le modèle sont proches de celles obtenues expérimentalement, et ce pour les différentes vitesses de sollicitation. Ces courbes sont légèrement au-dessus des valeurs expérimentales pour de faibles niveaux de déformations (0,4% pour la vitesse $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ par exemple). Une légère sous-estimation des contraintes est observée pour des déformations plus élevées. L'erreur relative maximale entre les prédictions et les données expérimentales est de l'ordre de 5%.

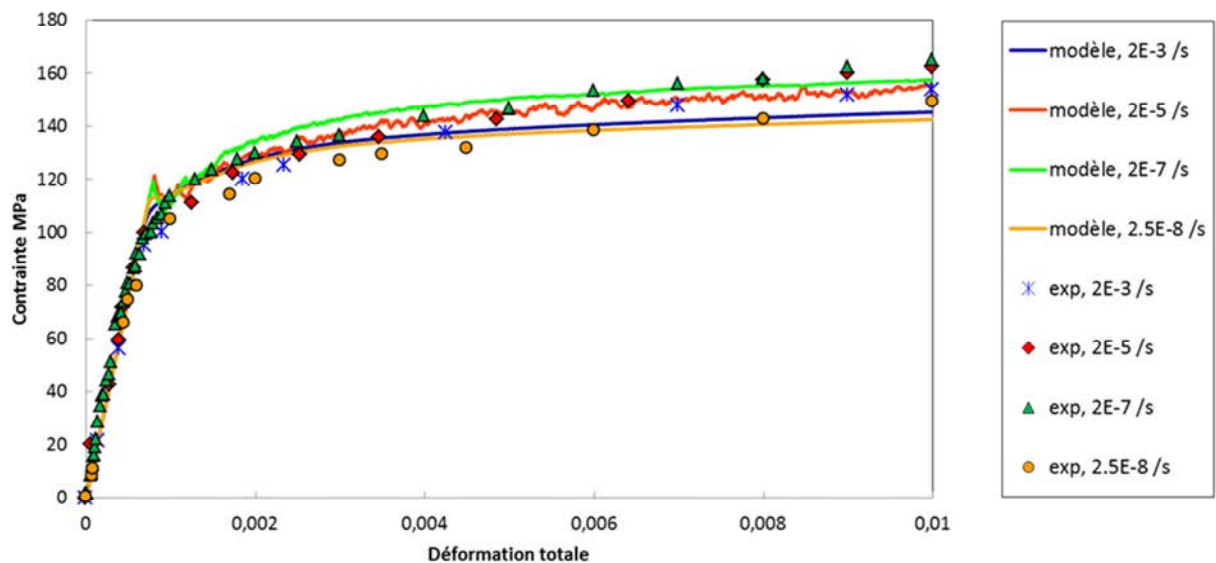


FIG. V-2: courbes de traction expérimentales et simulées avec le jeu de paramètres optimal (TAB.V-3). 316LN, 600°C

Sur la figure FIG.V-3 est tracée l'évolution des niveaux des contraintes, expérimentales et prédites par le modèle, pour différentes vitesses de déformation et ce à différents niveaux de déformation totale : 0.2%, 0.4% et 0.8%.

Un résultat important de cette identification réside dans la capacité du modèle à refléter l'effet du vieillissement dynamique qui se traduit par un effet inverse de la vitesse sur les niveaux des contraintes en diminuant la vitesse de sollicitation. Ainsi, en diminuant la vitesse de déformation entre 2.10^{-3} s^{-1} et 2.10^{-7} s^{-1} , et ce pour une même déformation totale appliquée, le niveau de la contrainte nécessaire à la plastification augmente. Ceci est lié aux interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de solutés en diffusion. La mobilité des solutés étant accélérée par les phénomènes de diffusion, des atmosphères d'impuretés se forment autour des dislocations lors de leur immobilisation par des obstacles, par exemple de type arbres de forêt. L'ancrage de ces dislocations est alors renforcé nécessitant des niveaux de contraintes encore plus importants afin de les libérer. Ces interactions se traduisent également par la présence de serrations sur les courbes de tractions. Des serrations sont également observées sur les courbes prédites par le modèle pour les deux vitesses 2.10^{-5} s^{-1} et 2.10^{-7} s^{-1} . On note un décalage du modèle par rapport aux résultats expérimentaux concernant l'apparition de ces serrations. En effet, expérimentalement, les serrations ont été observées à 600°C aux deux vitesses 2.10^{-3} s^{-1} et 2.10^{-5} s^{-1} , tandis que le modèle prédit des serrations aux deux vitesses 2.10^{-5} s^{-1} et 2.10^{-7} s^{-1} .

De plus, et toujours en accord avec les résultats expérimentaux, l'effet positif de la vitesse est rétabli pour des vitesses de sollicitation inférieures à 2.10^{-7} s^{-1} . Dans ce domaine, les vitesses des dislocations mobiles et des atomes de soluté sont comparables et les dislocations trainent les nuages d'impuretés lors de leur mouvement. Il ne s'agit donc plus d'un phénomène de blocage nécessitant une augmentation de la contrainte mais plutôt d'un ralentissement induit par une contrainte visqueuse appliquées sur les dislocations mobiles.

Enfin, comme on peut le voir sur la figure FIG.V-3, le modèle permet également de prédire le domaine de friction correspondant aux vitesses de déformations élevées. Ainsi, un effet positif de la vitesse est obtenu entre 2.10^{-3} s^{-1} et 2.10^{-2} s^{-1} . Dans ce domaine, les vitesses de dislocations mobiles sont tellement élevées que les atmosphères d'impuretés n'ont pas le temps de se former. Les solutés sont alors considérés comme des obstacles fixes et isolés.

Notons que le domaine de DSA identifié dans le cadre de ce travail est en accord avec les résultats expérimentaux obtenus par Gaudin (2002) sur un acier 316L à 623K (FIG.I-13), qui mettent en évidence l'activation du DSA entre 10^{-7} et 10^{-4} s^{-1} quel que soit le niveau de déformation.

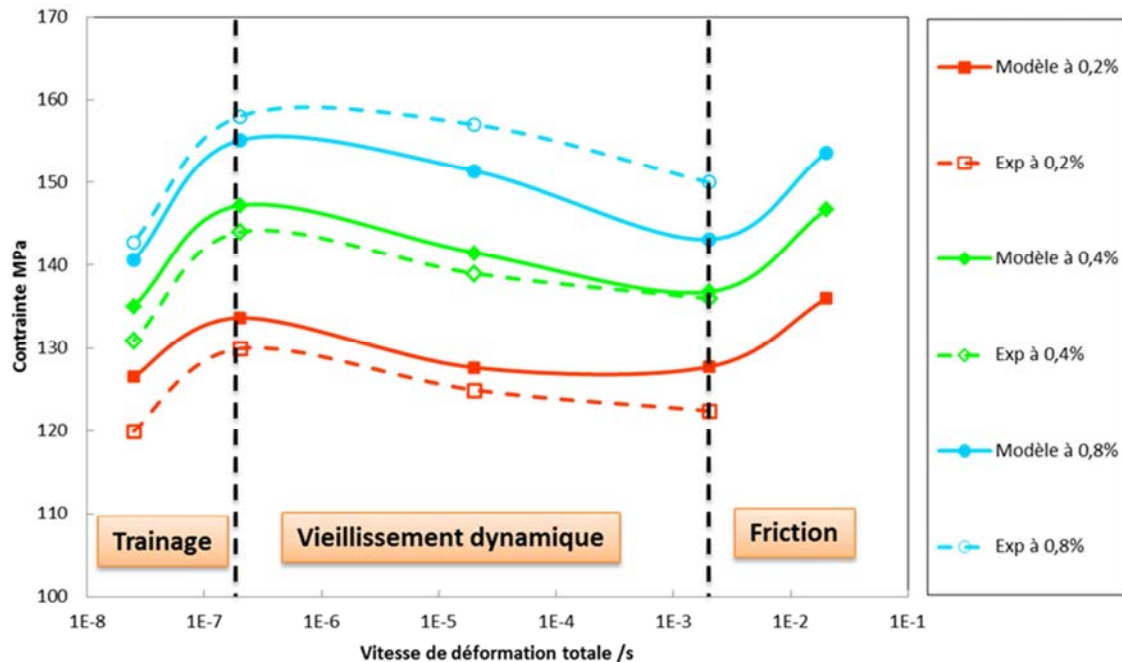


FIG. V-3: Evolution de la contrainte en fonction de la vitesse de déformation pour différents niveaux de déformation totale. Comparaison entre les prédictions du modèle avec le jeu de paramètre optimal (TAB.V-3) et les valeurs expérimentales issues des essais de traction. 316LN à 600°C.

4. Résultats

4.1. Relaxation

4.1.1. Effet du phénomène de DSA et comparaison avec les données expérimentales

Les trois paramètres du modèle ont été identifiés en comparaison avec des données expérimentales de traction monotone. Le modèle a ensuite été utilisé afin de prédire le comportement de l'acier 316LN sous différents types de chargements : relaxation, fluage et fatigue-relaxation, toujours à 600°C.

La première étape a été d'étudier la capacité du modèle adopté à prédire le comportement de l'acier 316LN en relaxation en prenant en compte l'effet du vieillissement dynamique et à l'inverse en ne considérant que la viscoplasticité dans les simulations (i.e $\tau_{DSA} = 0 \text{ MPa}$). Les figures FIG.V-4 et FIG.V-5 présentent les courbes de relaxation après une montée en charge d'une déformation totale de 0,3% et 0,6%, à une vitesse de déformation totale de 10^{-3} s^{-1} , et pour les deux températures 600°C et 500°C.

L'influence de l'introduction de la contrainte liée au vieillissement dynamique sur la contrainte relaxée est notable et ce indépendamment du niveau de déformation et de la température. A titre

d'exemple, pour une relaxation à 600°C à déformation totale 0.6% (FIG.V-2b), dans le cas où seule la viscoplasticité et l'effet de la montée des dipôles sont considérés (τ_{DSA} nulle), la relaxation est très importante et se fait de manière progressive ; le contrainte relaxée ($\sigma_0 - \sigma_{fin}$) est de l'ordre de 110MPa au bout de 7h de relaxation pour une contrainte nominale de $\sigma_0 = 140 \text{ MPa}$. Tandis que dans le cas où le vieillissement dynamique est pris en compte, la relaxation se fait très rapidement et un plateau est atteint dès les premières secondes de la phase de relaxation. La contrainte relaxée est dans ce cas moins important, de l'ordre de 31MPa.

Bien que les phénomènes de viscoplasticité favorisent une relaxation des contraintes, les interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de soluté en diffusion se traduisent par des ancrages plus forts et donc des contraintes supplémentaires afin de libérer et de déplacer les dislocations. Ceci se traduit par des relaxations moins importantes mais plus rapides que dans le cas où seuls les phénomènes viscoplastiques sont considérés.

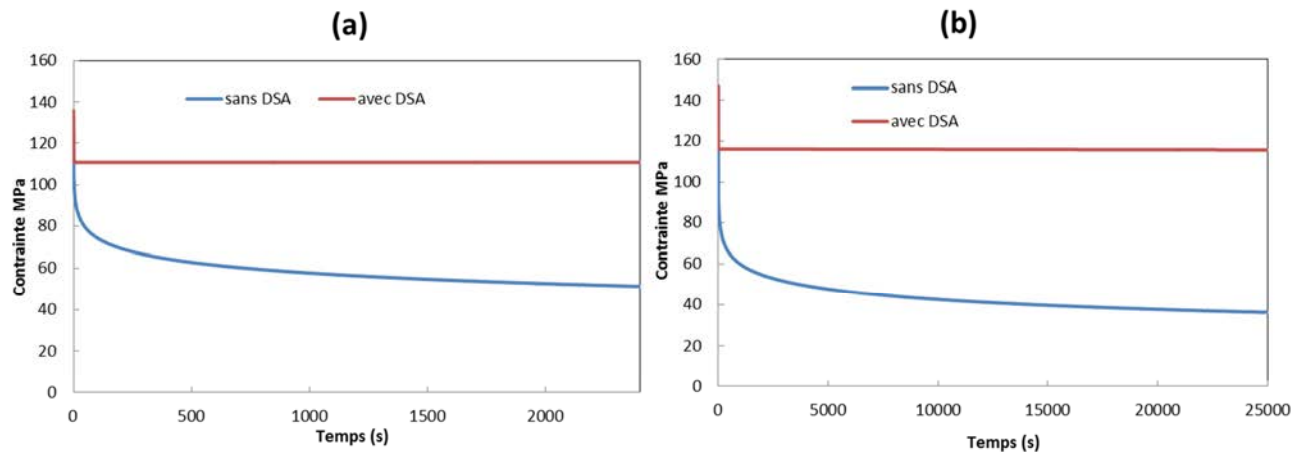


FIG. V-4: courbes de relaxation prédites avec et sans effet DSA avec deux niveaux de déformation totale (a) 0.3% (b) 0.6%. 316LN à 600°C, vitesse de montée en charge $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

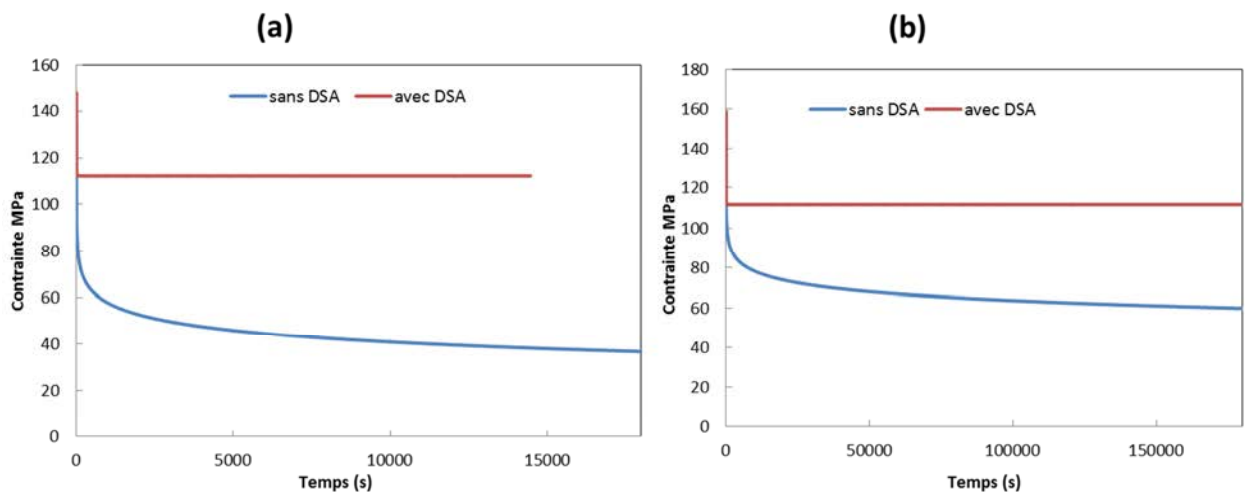


FIG. V-5: Courbes de relaxation prédites par le modèle avec et sans effet DSA (a) à 550°C et (b) à 500°C. 316LN, déformation totale 0.3%. Vitesse de montée en charge $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

Dans un second temps, le modèle a été utilisé afin de prédire le comportement de l'acier 316LN en relaxation à 600°C et à 550°C, et de comparer les courbes prédites avec les données expérimentales.

Les figures FIG.V-6 et FIG.V-7 présentent les courbes de relaxation, prédites et expérimentales, à 600°C et pour deux niveaux de déformation totale 0.2% et 0.6%. Dans ce cas, le durcissement lié au vieillissement dynamique a été pris en compte.

On constate que pour les deux niveaux de chargement, le modèle prédit une relaxation très rapide et ensuite l'apparition d'un plateau tout au long de la relaxation. La contrainte relaxée est atteinte dès les premiers stades de la phase de la relaxation et reste quasiment constante, contrairement aux résultats expérimentaux qui montrent une relaxation de contrainte plus progressive et évolutive au cours du maintien. On note néanmoins que les niveaux des contraintes prédites sont en accord qualitatif avec les données expérimentales. Les amplitudes des contraintes relaxées prédites par le modèle sont également assez proches des résultats expérimentaux.

Pour les deux relaxations à 600°C, l'erreur relative maximale entre les contraintes expérimentales et celles prédites par le modèle à la fin de chaque relaxation est de l'ordre de 18%.

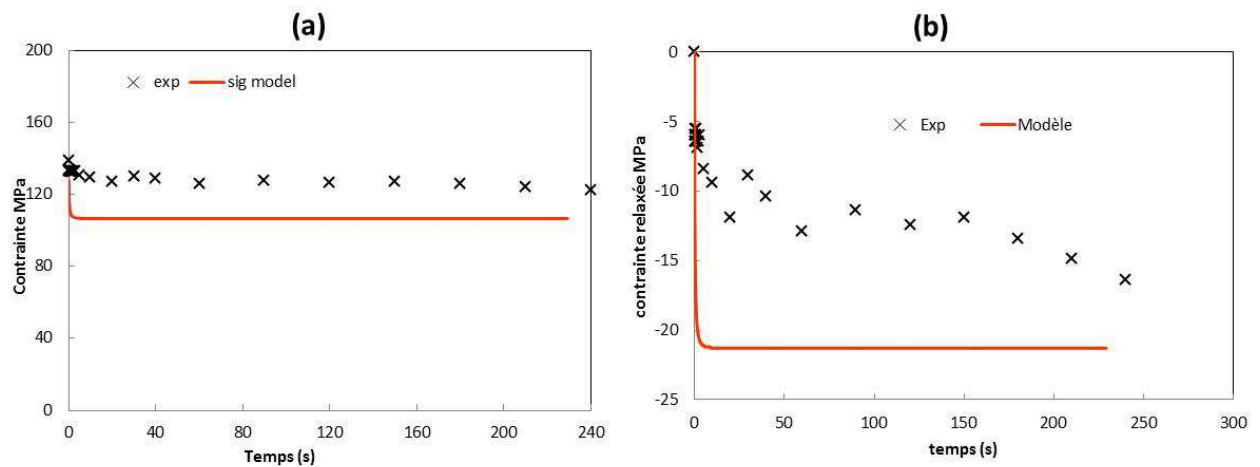


FIG. V-6: (a) courbes de relaxation prédite par le modèle et expérimentale (b) évolution de la contrainte relaxée ($\sigma - \sigma_0$) expérimentale et celle prédite par le modèle. Acier 316LN, 600°C, déformation totale de 0.2%, vitesse de mise en charge $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

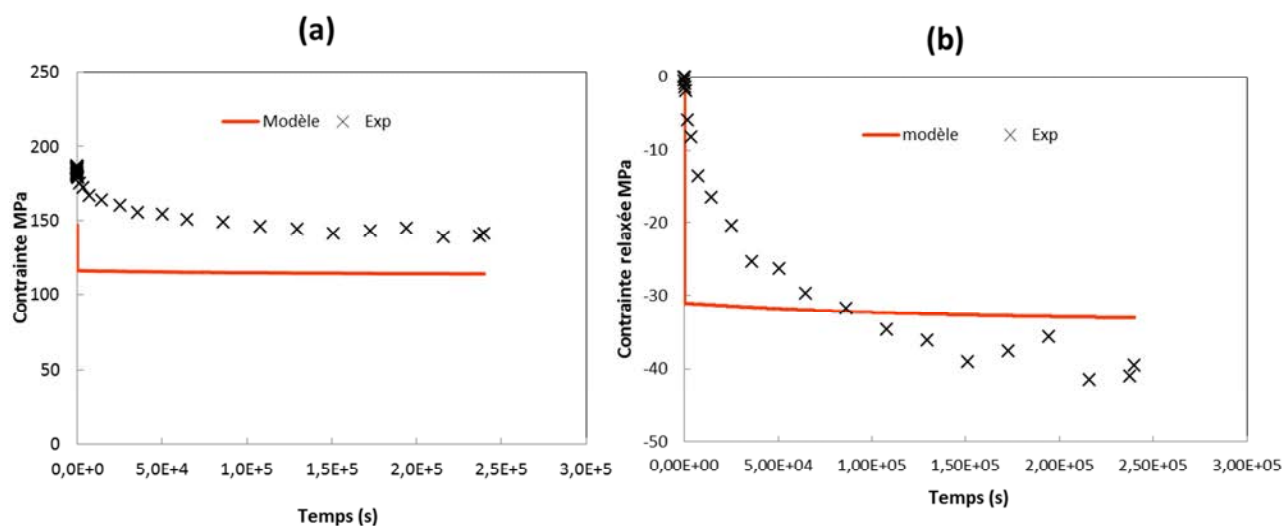


FIG. V-7: (a) courbes de relaxation prédite par le modèle et expérimentale (b) évolution de la contrainte relaxée expérimentale et celle prédite par le modèle. Acier 316LN, 600°C, déformation totale de 0.6%, vitesse de mise en charge $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$

La figure FIG.V-8 présente les courbes de relaxation obtenues à 550°C par le modèle et par l'expérience à un niveau de déformation de 0.3%. Là encore, le modèle est en accord qualitatif avec les données expérimentales. La courbe de relaxation expérimentale met en évidence une faible relaxation des contraintes, fort probablement liée au vieillissement dynamique qui induit un durcissement supplémentaire. La courbe prédite surestime toutefois les niveaux des contraintes relaxées.

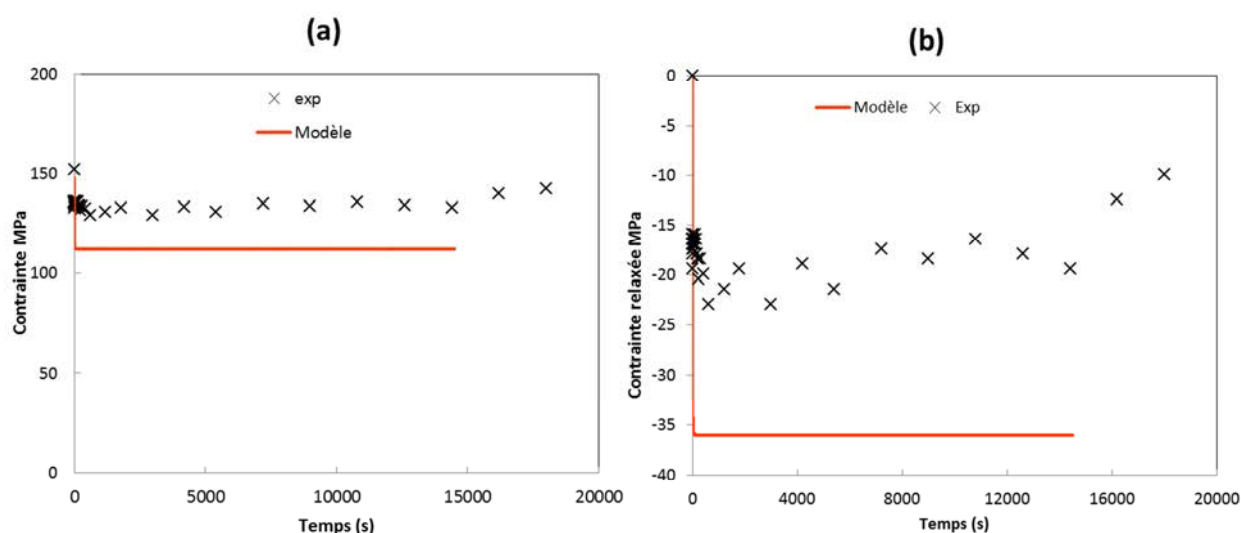


FIG. V-8: Courbes de relaxation prédite par le modèle et expérimentale (b) évolution de la contrainte relaxée expérimentale et celle prédite par le modèle. Acier 316LN, 550°C, déformation totale de 0.3%, vitesse de mise en charge $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

4.1.2. Influence de la densité de dislocations initiale :

Une étude paramétrique a été réalisée afin d'étudier l'effet de la densité de dislocation initiale ainsi que la vitesse de montée en charge sur les prédictions du modèle. Dans le cadre de cette étude et conformément à ce que la littérature rapporte, la valeur de la densité initiale considérée est de l'ordre de 10^{12} m^{-2} . Etant donné l'erreur de mesure notable sur les densités dans les matériaux revenus, il est important d'étudier la stabilité des prédictions aux erreurs expérimentales sur ce paramètre.

La figure FIG.V-9 présente les courbes de relaxation prédites par le modèle pour l'acier 316LN à 600°C et 0,2% d'amplitude de déformation pour trois valeurs différentes de la densité initiale : $\rho_0 = 10^{12} \text{ m}^{-2}$, $3 \times \rho_0$, $\rho_0/3$ avec autant de dislocations vis que de dislocations coin. Le cas : $\rho_0 = 10^{12} \text{ m}^{-2}$ avec $\rho_0/4$ de dislocations vis et $\frac{3}{4}\rho_0$ de dislocations coin est aussi considéré.

Nous notons que la valeur de la densité de dislocations initiale n'a que peu d'influence sur la réponse du modèle. L'introduction d'une grande densité de dislocations initiale induit un durcissement plus important en traction ainsi qu'une contrainte à saturation en relaxation légèrement supérieur, l'écart reste néanmoins relativement faible. Il en est de même pour la contrainte relaxée prédite dans les quatre cas. La valeur de la contrainte relaxée à saturation varie entre 18 MPa et 21 MPa.

Nous pouvons conclure que la réponse du modèle dépend peu de la valeur de la densité de dislocations initiale, si cette dernière correspond à un matériau recuit.

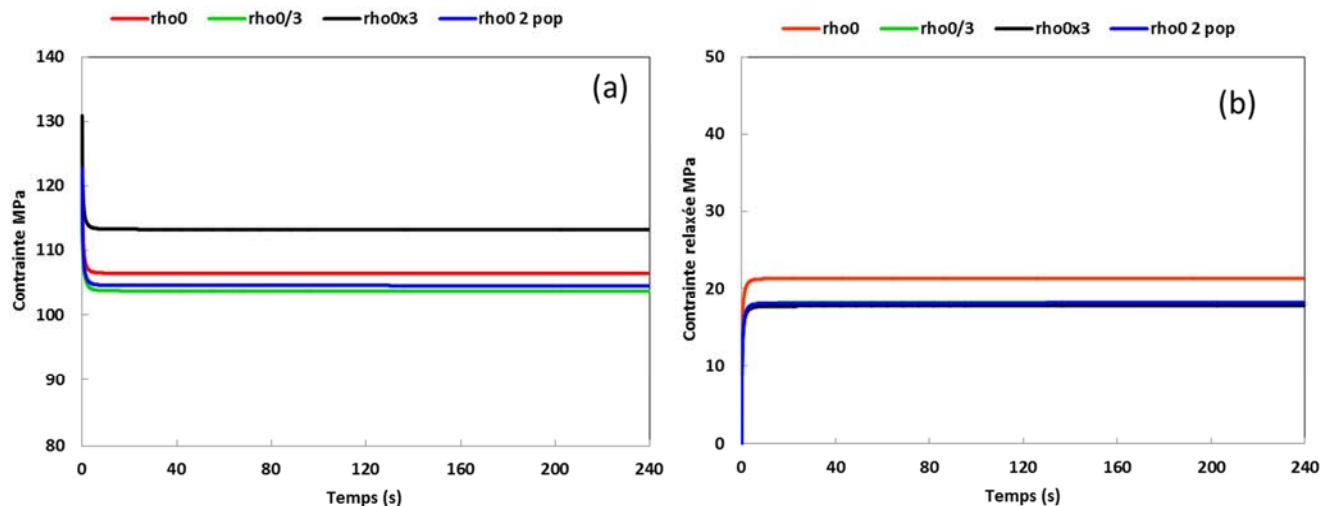


FIG. V-9: Influence de la densité de dislocation initiale sur (a) l'évolution de la contrainte au cours de la relaxation (b) sur l'évolution de la contrainte relaxée. 316LN, amplitude de déformation totale 0,2%, 600°C. $\rho_0 : 10^{12} \text{ m}^{-2}$, $\rho_0 \text{ 2pop} : 1/4$ des dislocations vis et $3/4$ des dislocations coins. Calcul à 600°C.

4.1.3. Effet et de la vitesse de montée en charge

Comme nous l'avons vu précédemment, la réponse de l'acier 316LN en traction dépend de la vitesse de chargement. Les essais de traction réalisés dans le cadre de ce travail ont mis en évidence différents régime de vitesses de déformation :

- Vitesses très faibles (inférieures à $2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$) : domaine de trainage et effet positif de la vitesse.
- Vitesses moyennes (entre $2 \cdot 10^{-7}$ et $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) : domaine de DSA et effet inverse de la vitesse.

En traction monotone, le modèle prédit bien l'ensemble de ces régimes, avec en plus un régime de friction pour des vitesses supérieures à 10^{-3} s^{-1} (figure FIG.V-3).

Dans le cas de chargements de relaxation et de fluage à haute température, la vitesse de mise en charge peut avoir un effet sur la réponse du matériau au cours de la relaxation. En effet, les essais de relaxation menés par Auzoux (2004) à 600°C sur un acier 316LN à l'état hypereutecté montrent un effet de la vitesse de mise en charge sur les niveaux de contraintes atteints lors de la phase de relaxation. Néanmoins, ce paramètre (vitesse de chargement) influence relativement peu l'évolution des contraintes relaxées normalisées (i.e le rapport $\sigma(t)/\sigma_0$).

Afin d'étudier l'effet de la vitesse de mise en charge, le modèle a été utilisé pour prédire les courbes de relaxation pour l'acier 316LN avec trois vitesses de mise en charge : 10^{-3} , 10^{-5} et 10^{-7} s^{-1} . Le niveau de déformation étudié est de $2 \cdot 10^{-3}$ avec une durée de relaxation de 240 s. L'évolution de la contrainte relaxée normalisée ($\sigma(t)/\sigma_0$) prédite par le modèle pour les trois vitesses de mise en

charge à 600°C est présentée sur la figure FIG.V-10. Nous notons un effet de la vitesse de montée en charge sur la relaxation des contraintes au cours de la relaxation. La contrainte relaxée diminue lorsque la vitesse de montée en charge diminue également. Le rapport $\sigma(t)/\sigma_0$ évolue très peu pour

la vitesse 10^{-7} s^{-1} (de l'ordre de 0.98 après 250s de relaxation). La relaxation de la contrainte est plus élevée avec une montée en charge de 10^{-3} s^{-1} , le rapport des contraintes étant de l'ordre de 0.83 après 250s de relaxation.

Cet effet peut être corrélé au phénomène du vieillissement dynamique. Tel qu'il a été défini et identifié dans le modèle, le phénomène du DSA est activé dans le domaine des vitesses moyennes (entre 10^{-7} et 10^{-3} s^{-1}). L'effet de l'ancrage des dislocations par des nuages d'atomes de soluté augmente lorsque la vitesse diminue dans ce domaine (effet inverse de la vitesse). Ceci se traduit par une composante de la contrainte liée au DSA plus élevée aux faibles vitesses de déformation (10^{-7} s^{-1} dans notre cas). Cette composante n'étant pas relaxée au cours du maintien, la contrainte relaxée dans le cas de faibles vitesses demeure très faible. En outre, la contrainte thermique, qui elle dépend positivement de la vitesse, est de plus en plus faible lorsque la vitesse de sollicitation diminue d'où la faible relaxation pour les faibles vitesses de déformation.

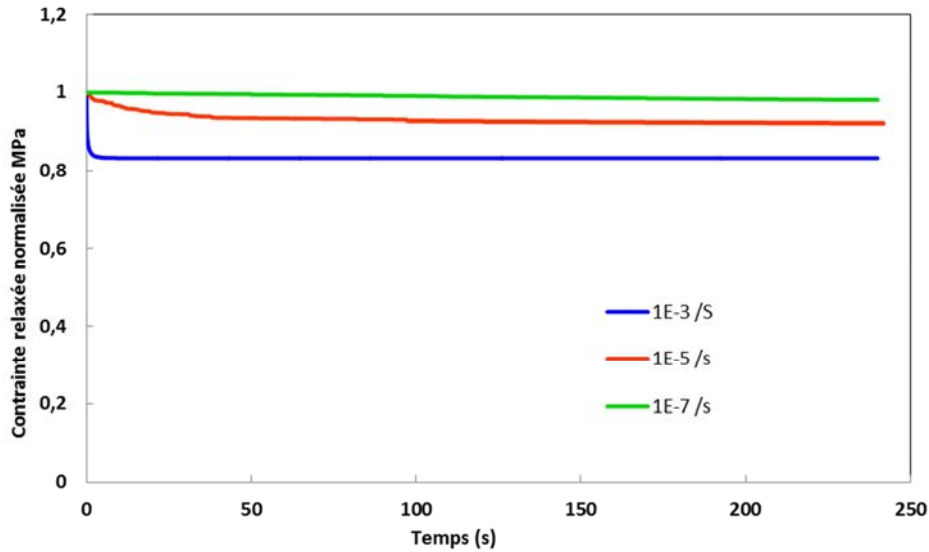


FIG. V-10: effet de la vitesse de mise en charge sur l'évolution de la contrainte relaxée prédite par le modèle, pour l'acier 316LN, 600°C, déformation totale de $2 \cdot 10^{-3}$.

4.1.4. Relation entre temps de relaxation et le DSA

Comme nous l'avons évoqué auparavant dans ce chapitre, la relaxation prédite par le modèle dans le cas d'une vitesse de mise en charge est très rapide voire instantanée avec l'apparition d'un plateau de contrainte dès les premiers stades de la relaxation et ce tout le long de la relaxation.

Il a également été montré que l'apparition de cette saturation est liée à la contrainte induite par les interactions entre dislocations mobiles et atomes de solutés (τ_{DSA}). La figure FIG.V-11 présente l'évolution en fonction du temps de la concentration en atomes de soluté autour des dislocations (équation V.11) et celle de la contrainte induite par cette concentration (équation V.10) à 600°C. Nous pouvons noter que la concentration C_s et par conséquent la contrainte τ_{DSA} saturent rapidement et atteignent leurs valeurs finales en moins de 0,5 seconde.

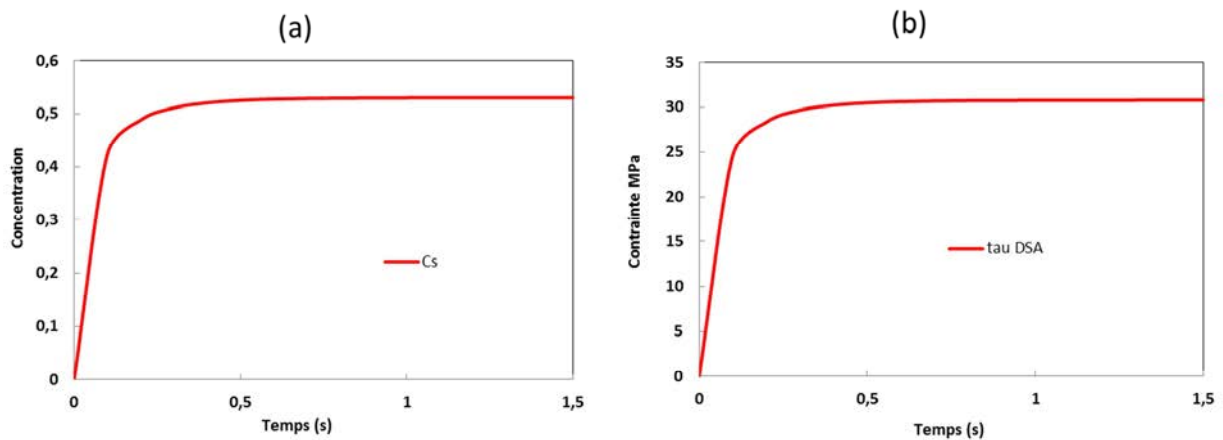


FIG. V-11: (a) Evolution de la concentration en atomes de soluté autour de la dislocation (équation V.11) et (b) de la contrainte liée aux interactions entre dislocations mobiles et nuages d'impuretés τ_{DSA} (équation V.10)

Afin de mieux mettre en évidence le lien entre le temps nécessaire pour atteindre la saturation en relaxation prédit par le modèle (appelé ici temps de relaxation) et le temps caractéristique du vieillissement dynamique (δ), nous présentons leurs évolutions respectives en fonction de la température sur la figure FIG.V-12. Nous nous retrouvons donc avec une relation linéaire entre ces deux temps caractéristiques. A 600°C, le temps de relaxation prédit par le modèle est de l'ordre de 2 secondes, un temps relativement court mais suffisant pour que la concentration des atomes de chromes autour des dislocations mobiles sature, tout comme la contrainte induite par ces interactions. Notons que la partie de la contrainte critique induite par les interactions entre dislocations mobiles et arbres de forêt est de l'ordre de 4,4 MPa pour une densité totale de $10^{12} m^{-2}$, une valeur bien inférieure à celle de la contrainte τ_{DSA} à saturation (~ 30 MPa à 600°C).

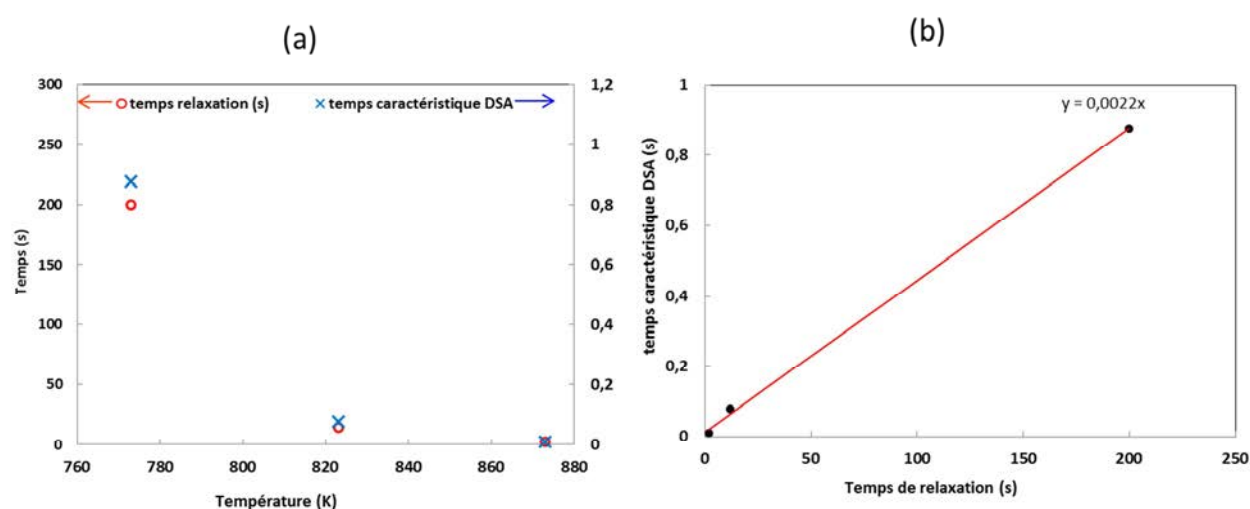


FIG. V-12: (a) Evolution en fonction de la température du temps de saturation de la contrainte prédit par le modèle en relaxation et le temps caractéristique du vieillissement dynamique δ (équation V.13) ; (b) relation entre le temps caractéristique de relaxation prédit par le modèle et le temps δ .

4.2. Fluage

Le modèle a également été utilisé pour prédire le comportement de l'acier 316LN en fluage. La figure FIG.V-13 présente les courbes prédites et expérimentales en fluage avec une contrainte de chargement de 120 MPa. La tendance prédite par le modèle est en accord avec la courbe expérimentale, avec une déformation qui augmente progressivement au cours du fluage. Le modèle sous-estime néanmoins les niveaux de la déformation au début du fluage. Une surestimation est observée pour des temps de maintien en fluage relativement élevés (à partir 3×10^5 s). Dans l'état actuel, le modèle fait appel à des lois cristallines qui décrivent correctement les phénomènes de relaxation mais qui sont probablement insuffisantes pour décrire les phénomènes physiques intervenant lors du fluage. Le modèle est donc à enrichir afin de mieux prendre en compte ces différents aspects.

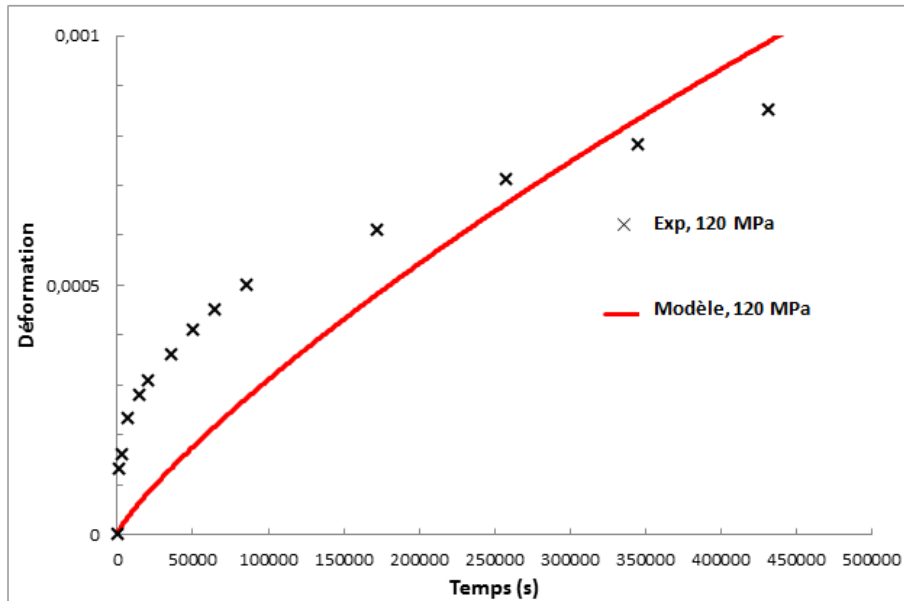


FIG. V-13: Courbes de fluage expérimentale et prédite par le modèle. Acier 316LN, 600°C à 120 MPa

4.3. Fatigue-relaxation

Des calculs de fatigue-relaxation ont également été réalisés dans le but d'étudier la capacité du modèle à prédire le comportement de l'acier austénitique 316LN lorsqu'il est soumis à ce type de chargement à haute température. La figure FIG.V-14 présente l'évolution de la contrainte d'un acier 316LN soumis à un chargement de fatigue-relaxation pour une amplitude de déformation totale imposée de 0.28%, une vitesse de mise en charge de 2.10^{-3} s^{-1} et un temps de maintien en traction de 30min, à 600°C. Pour ce chargement, plus de 300 cycles de fatigue-relaxation ont été appliqués.

On note sur les courbes de la figure FIG.V-14 un faible durcissement lors des deux premiers cycles puis une stabilisation très rapide des niveaux des contraintes en fonction du temps (ou du nombre de cycles). La contrainte en traction maximale passe de 135MPa à la première montée en charge à 139MPa au 3eme cycle. Cette valeur restera constante tout le long des cycles suivants, comme le montre la figure FIG.V-15. Ce faible durcissement est caractéristique du comportement cyclique induit par l'hypothèse de réversibilité totale dans les mécanismes de Bowing-out/Bowing-in. Cet aspect sera abordé à la fin de ce chapitre.

Nous observons également une légère augmentation de la contrainte atteinte en fin de maintien en traction avec le nombre de cycles. Au premier cycle, cette contrainte vaut 110MPa et elle vaut 116MPa à partir du troisième cycle de maintien. Néanmoins, tout comme pour la contrainte maximale en traction, la contrainte atteinte lors du maintien se stabilise très rapidement et reste constante lorsque le nombre de cycles augmente.

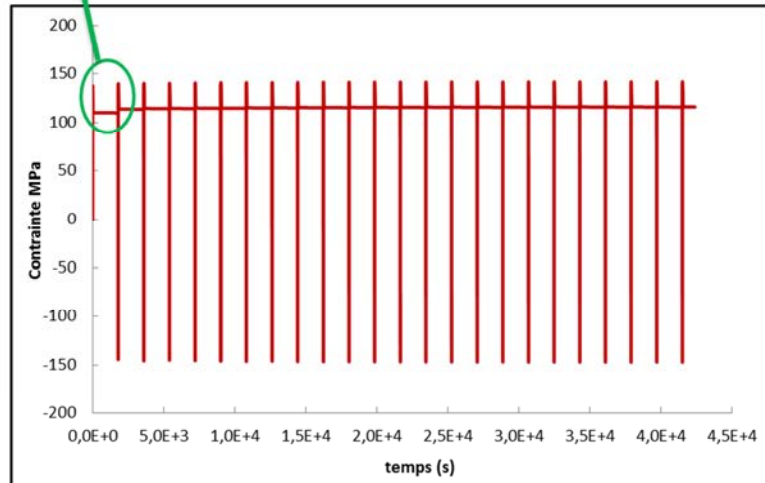
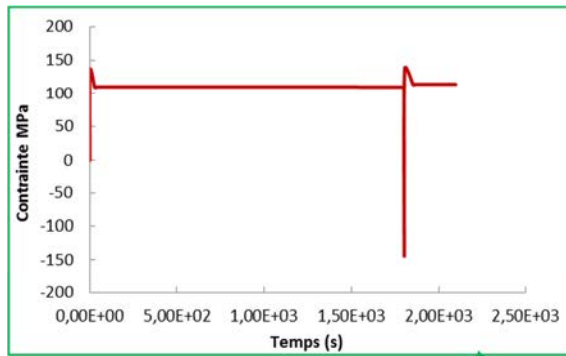


FIG. V-14: Evolution de la contrainte en fonction du temps au cours d'un chargement de fatigue-relaxation pour une déformation totale imposée de 0.28% et 30 min de maintien en traction (prédiction). 316LN, 600°C.

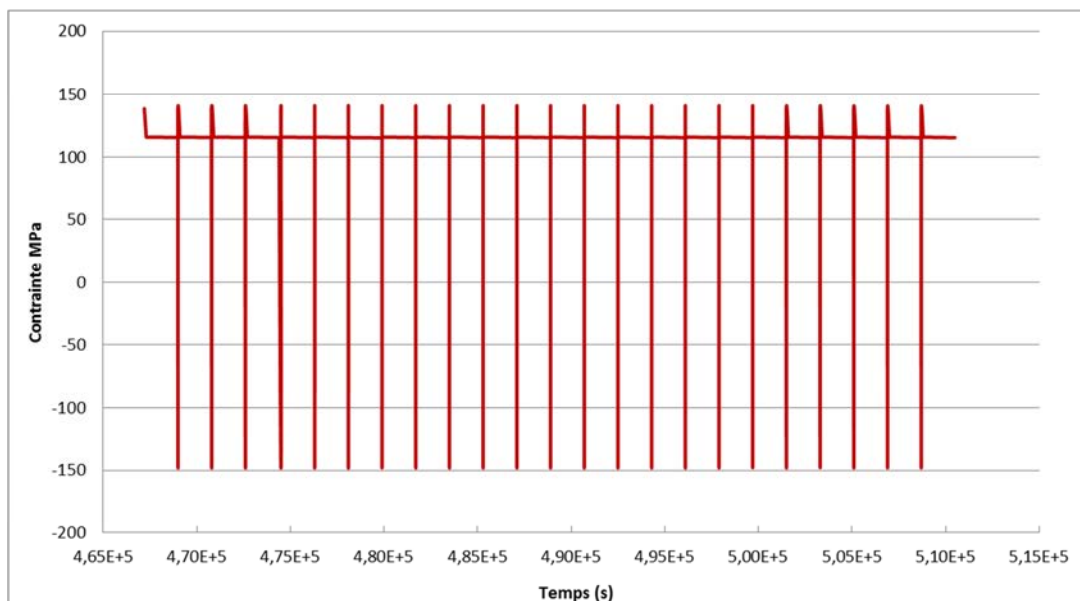


FIG. V-15: Evolution de la contrainte en fonction du temps au cours d'un chargement de fatigue-relaxation pour une déformation totale imposée de 0.28% et 30 min de maintien en traction (prédiction). 316LN, 600°C.

Les deux figures FIG.V-16 et FIG.V-17 présentent les évolutions prédites des densités de dislocations coins, vis et dipôles ainsi que la densité totale au cours du cyclage intercalé par des maintiens en traction. Pour les trois populations de dislocations (coin, vis et dipôles), on note que les densités augmentent au cours des premiers cycles avec une production importante de dipôles, puis se stabilisent rapidement en atteignant une sorte de plateau. L'augmentation de la densité des dipôles est la plus importante car cette densité, initialement nulle, atteint $7.8 \times 10^{11} \text{ m}^{-2}$ à saturation. Cette valeur est du même ordre que la densité des dislocations vis. La densité des dislocations coin à saturation est légèrement supérieure aux densités des dislocations vis et des dipôles.

La figure FIG.V-17 permet de faire un zoom sur l'évolution des densités de ces différentes populations au cours des premiers cycles de fatigue-relaxation. Pour les deux populations coin et vis, la densité des dislocations augmente généralement en fonction du nombre de cycles jusqu'à saturation. Toutefois, elle évolue également au cours de chaque cycle. Au cours du maintien, la densité est constante et n'évolue pas avec le temps. Ceci est fort probablement dû à l'absence d'un terme d'annihilation par montée dans les équations bilan de ces deux populations. Nous tenons également à noter que la prise en compte d'un terme de montée pour les dipôles induit un adoucissement avec une baisse de leur densité qui se produit à chaque maintien.

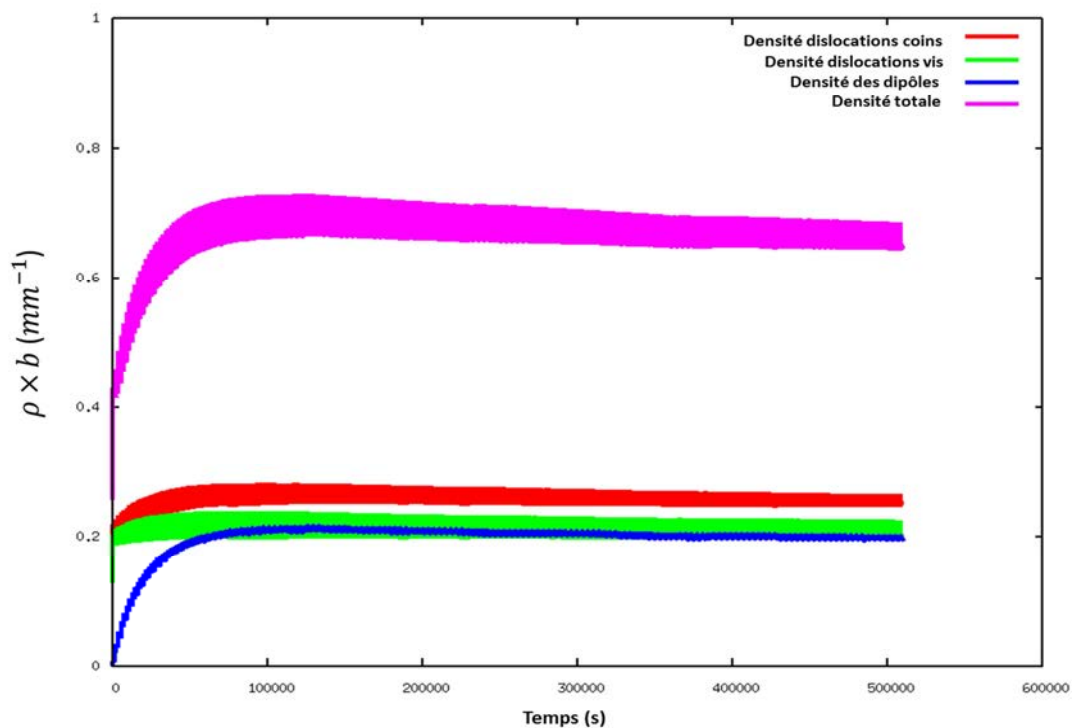


FIG. V-16: Evolution des densités des dislocations coin, vis, dipôles et totales en fonction du temps, prédites par le modèle. fatigue-relaxation, amplitude de déformation totale de 0.28%, vitesse de montée en charge 2.10^{-3} s^{-1} , 30min de maintien en traction, 600°C. La densité de dislocation est normalisée par le module du vecteur de Burgers.

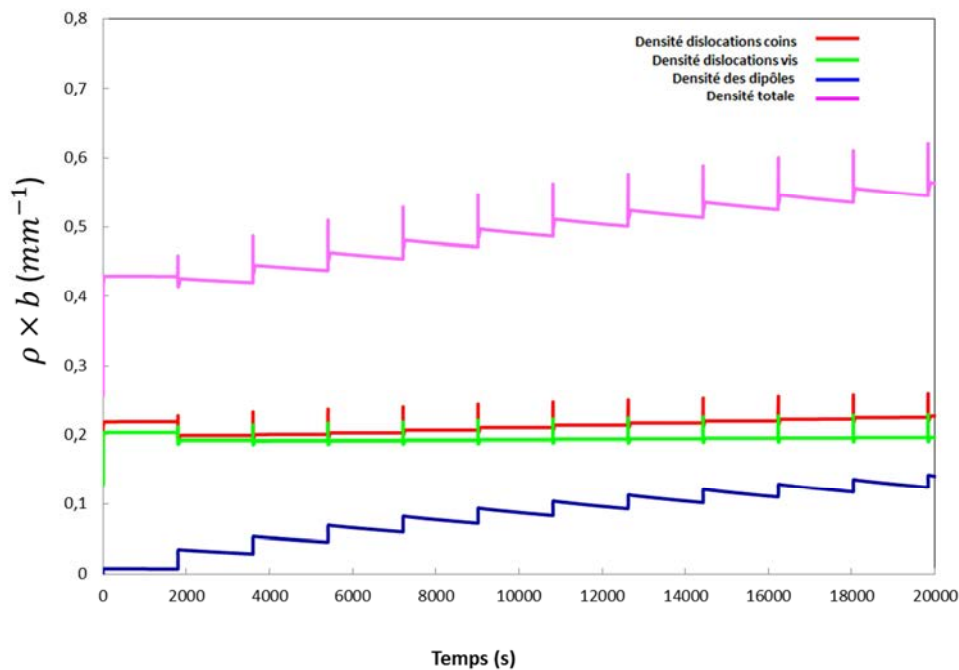


FIG. V-17: Evolution des densités de dislocation coin, vis, dipôles et totale au cours des premiers cycles de fatigue relaxation. 316LN, 600°C, amplitude de déformation totale de 0.28%, vitesse de montée en charge $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, 30min de maintien en traction. La densité de dislocation est normalisée par le module du vecteur de Burgers.

Par contre, selon les prédictions du modèle, la densité des dipôles créés évolue avec le temps lors de maintien. Ceci est mis en évidence sur la figure FIG.V-18, qui présente l'évolution de la densité des dipôles (normalisée par le module du vecteur de Burgers) en fonction du temps au cours des premiers cycles. On observe une augmentation de la densité des dipôles lors de la montée en charge et une chute de la densité au cours du maintien. On note également que les valeurs maximale et minimale de cette densité atteinte à chaque cycle augmentent avec l'augmentation du nombre de cycles.

L'augmentation de la densité des dipôles est due à l'interaction entre dislocations coins libres traduite par le terme de création dans l'équation bilan des dipôles, tandis que la baisse de la densité des dipôles au cours du maintien est principalement due aux phénomènes de viscoplasticité (relaxation) et à l'annihilation des dislocations coins (formant les dipôles) par montée. Au cours des premiers cycles, la densité des dipôles prédite par le modèle ne disparaît pas entièrement au cours du maintien, induisant ainsi une augmentation globale de cette densité en fonction du nombre de cycles. Néanmoins, comme le montre la figure FIG.V-15, la densité des dipôles atteint un stade de saturation durant lequel, elle n'évolue plus en fonction du nombre de cycles (globalement). La figure FIG.V-17b met en évidence qu'à ce stade de saturation, au cours de chaque cycle de fatigue-relaxation, les dipôles créés lors de la partie cyclique pure sont entièrement annihilés au cours de la relaxation. On peut dire que nous avons atteint à ce stade un équilibre et que la densité des dipôles créés est équilibrée par la densité des dipôles disparus.

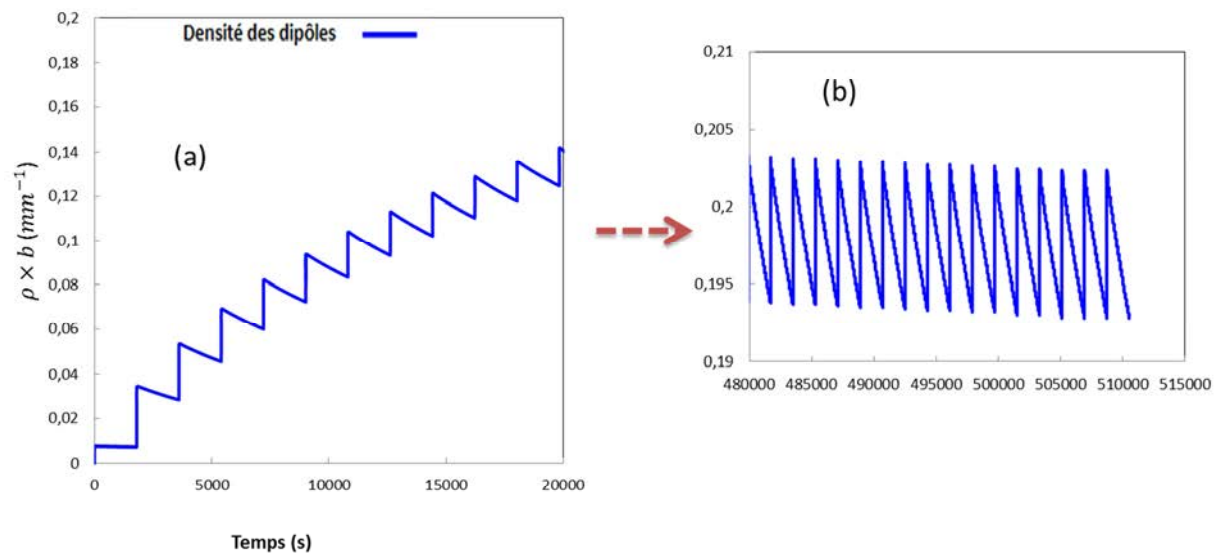


FIG. V-18: Evolution de la densité des dipôles en fonction du temps (a) au cours des premiers cycles de fatigue-relaxation (b) à la fin du cyclage (300 cycles). 316LN à 600°C, +/-0.28%, 30min de maintien.

Les courbes présentées sur les figures FIG.V-19 et FIG.V-20 correspondent à différents cycles de relaxation prédits par le modèle. L'évolution de la contrainte expérimentale au cours de ces relaxations est également présentée pour comparaison. En accord avec les résultats précédents, le modèle prédit très correctement les premières relaxations (cycle 1 et cycle 2). Les contraintes prédites par le modèle sont très proches de celle mesurées expérimentalement. Les contraintes correspondant au début de la relaxation prédites par le modèle sont légèrement inférieures à celles mesurées. Toutefois l'évolution de la contrainte au cours de la relaxation, simulée est identique à celle donnée par l'expérience.

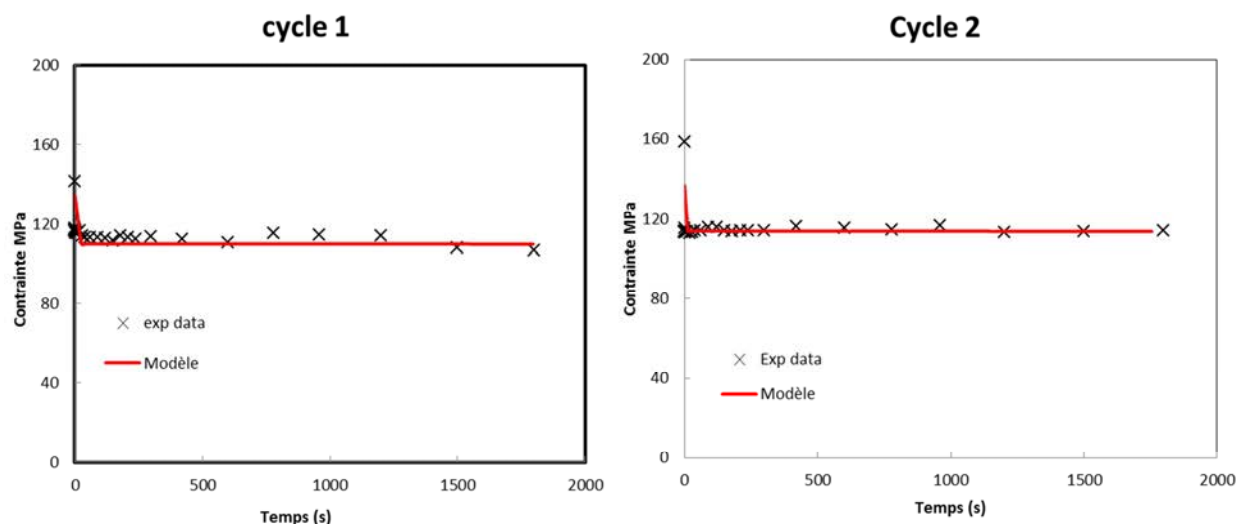


FIG. V-19: comparaison entre résultats du modèle et données expérimentales: fatigue relaxation 600°C, amplitude de déformation totale 0,28%, vitesse de montée en charge 2.10^{-3} s^{-1} , temps de maintien en traction 30min, 1^{ère} et 2^{nde} relaxation.

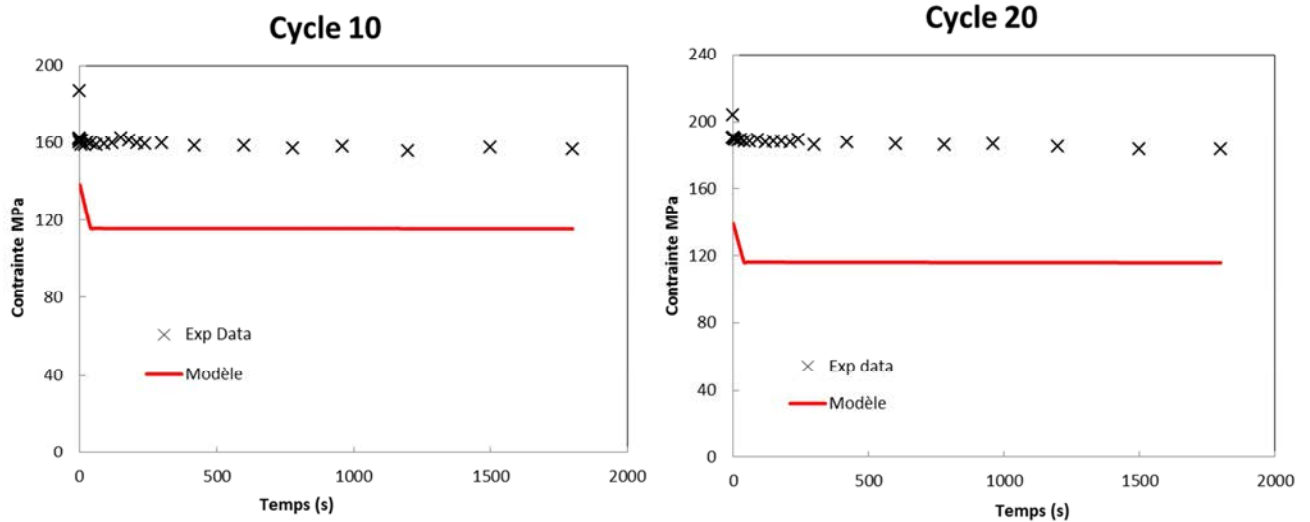


FIG. V-20: comparaison entre résultats du modèle et données expérimentales: fatigue relaxation 600°C, amplitude de déformation totale 0,28%, vitesse de montée en charge $2 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, temps de maintien en traction 30min, 10^{ème} et 20^{ème} relaxation.

Néanmoins, au fur et à mesure que le nombre de cycles augmente, les prédictions du modèle sous-estiment largement les niveaux des contraintes, que ce soit dans la partie de fatigue pure (contrainte maximale au début de la relaxation) ou pendant la relaxation. L'expérience met en évidence un écrouissage cyclique même pour des chargements de fatigue relaxation avec de longs temps de maintien ([Sauzay et al., 2004], essais de fatigue-relaxation à 500°C et 50h de temps de maintien). Il faut rappeler que dans la formulation du modèle, seul l'écrouissage « isotrope » est pris en compte avec un terme lié à un écrouissage induit par les interactions entre dislocations mobiles et les arbres de forêt et un terme décrivant les interactions entre dislocations mobiles et les nuages d'impuretés. Dans le cas des chargements cycliques, des interactions liées à la formation d'une structure de dislocations (même lâche) peuvent induire des interactions de longue distance et donc un écrouissage cinématique. L'introduction d'un écrouissage cinématique non linéaire de type Armstrong-Fredrick avec une identification sur des courbes cycliques de monocristaux à haute température permettrait probablement d'améliorer la capacité du modèle à prédire le comportement en fatigue pure et en fatigue-relaxation à haute température. Des modèles d'écrouissage cinématique similaires à ceux du chapitre 2 pourraient permettre de reproduire le durcissement intra-granulaire lié aux microstructures des dislocations.

La prise en compte de l'irréversibilité du glissement plastique au cours du chargement cyclique pourrait également être considérée. Dans la construction initiale du modèle, le signe du terme de production des dislocations coin et vis libre varie avec l'évolution du signe de contrainte résolue sur le système de glissement au cours du cycle (FIG.V-21) : traction (parties 1 et 4) et compression (parties 2 et 3). Il est en fait possible d'avoir du « bowing-out » (parties 1 et 3) ou du « bowing-in » (parties 2 et 4). L'idée est de prendre en compte dans le terme de production la densité des dislocations qui auraient changé de plan atomique (montée, glissement dévié) ou disparu au cours du premier quart du cycle, ce qui permettrait d'avoir une accumulation des dislocations plus importante qu'avec le modèle actuel, du fait de l'irréversibilité.

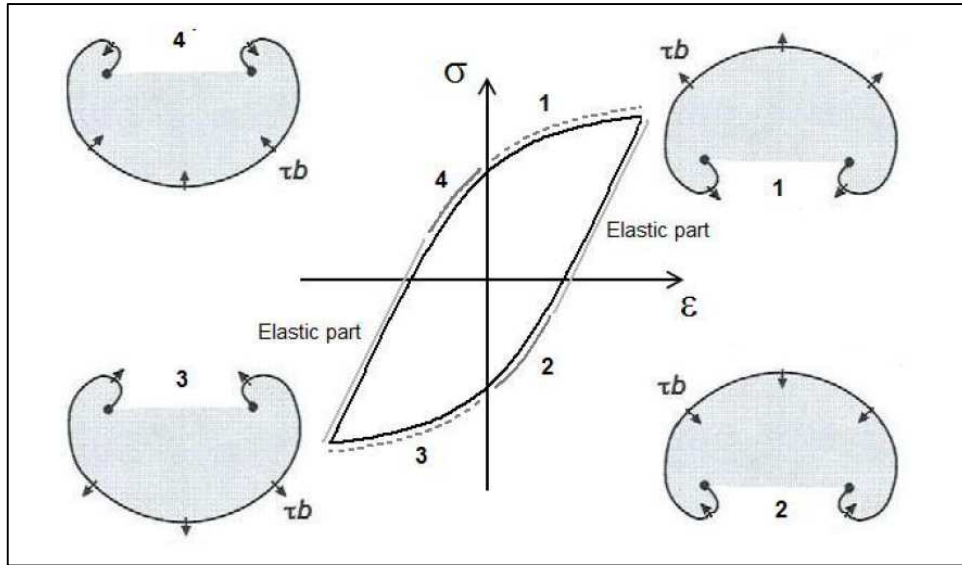


FIG. V-21: schéma d'une course de Frank-Read sur un système de glissement actif (Giordana et al., 2011).

Afin d'estimer l'effet de cette irréversibilité, nous cherchons à maximiser son effet en la supposant totale. A la fin de la montée en charge, les dislocations sont supposées glisser sur des plans atomiques différents au cours de la décharge. Ceci revient à supprimer les facteurs $\text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}}{\dot{\gamma}_{i,s}^{vp}}\right)$ et $\text{sign}\left(\frac{\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}}{\dot{\gamma}_{i,e}^{vp}}\right)$ des deux équations (V.1) et (V.2) respectivement.

Des calculs ont été réalisés avec la précieuse aide de P.-F. Giroux afin d'étudier l'effet de l'irréversibilité totale sur les prédictions du modèle en fatigue pure et en fatigue relaxation. Le matériau étudié est toujours le 316LN à 600°C.

La figure FIG.V-22 présente la courbe de traction et la courbe d'écrouissage cyclique prédites avec irréversibilité totale. La prise en compte de l'irréversibilité totale dans la construction du modèle permet de prédire l'écrouissage cyclique de façon meilleure que la première version modèle qui supposait une réversibilité totale du glissement des boucles de dislocations et induisait une saturation instantanée de la contrainte (contrainte à saturation quasiment égale à celle atteinte au premier quart de cycle).

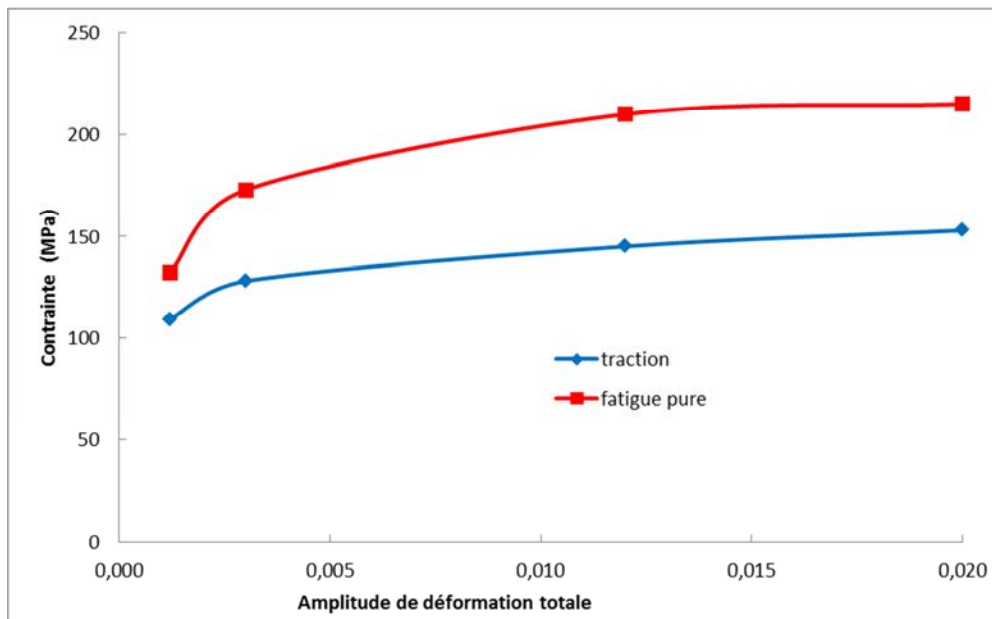


FIG. V-22: courbes de traction et d'écrouissage cyclique prédites par le modèle avec irréversibilité totale

La figure FIG.V-23 présente les courbes de fatigue-relaxation prédites pour l'acier 316LN à 600°C et pour une déformation totale de 0,28%. Les deux hypothèses : irréversibilité totale et réversibilité totale sont considérées.

Nous notons un effet non négligeable de la prise en compte de l'irréversibilité sur les prédictions du modèle. Comme attendu, l'hypothèse de l'irréversibilité totale induit un durcissement plus important que dans le cas où la réversibilité totale est considérée. Ce durcissement augmente avec le nombre de cycles, conformément aux résultats expérimentaux. Ceci est dû à une augmentation de la densité de dislocations stockées et par conséquent un écrouissage « isotrope » cyclique plus élevé.

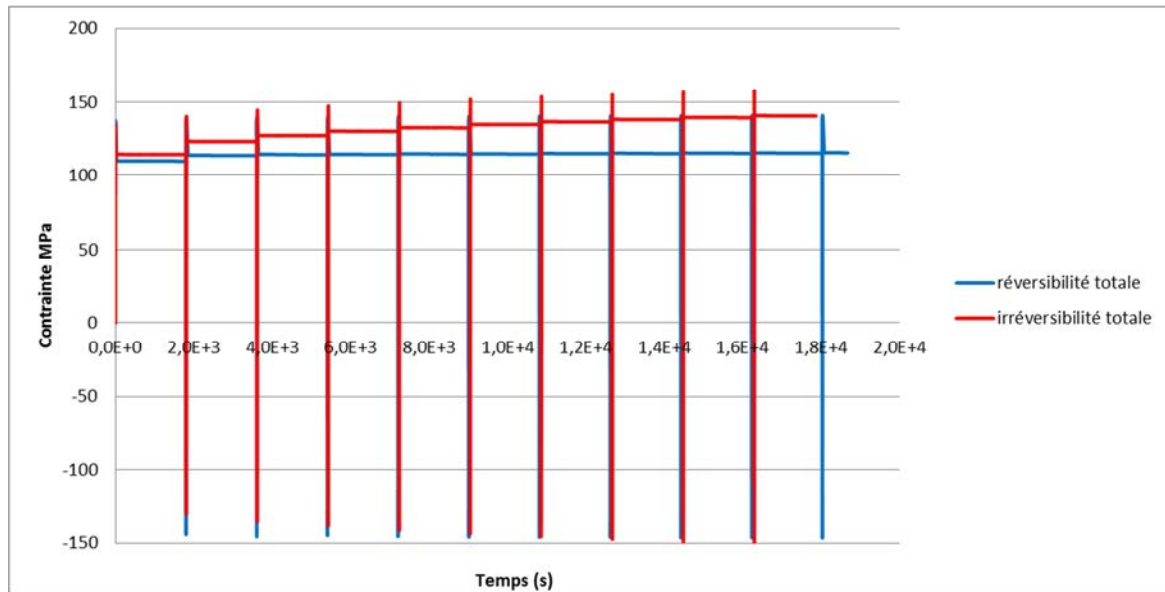


FIG. V-23: Influence de l'effet de l'irréversibilité totale sur les prédictions du modèle. Fatigue-relaxation, acier 316LN, 600°C, amplitude de déformation 0,28%, vitesse de chargement 2.10^{-3} s^{-1} .

5. Conclusion

Un modèle micromécanique a été proposée afin de modéliser le comportement mécanique de l'acier austénitique en fatigue-relaxation à haute température. L'ensemble des mécanismes régissant ce comportement et activés à haute température : viscoplasticité, montée des dislocations coin et vieillissement dynamique. Ces mécanismes ont été identifiés grâce à des mesures expérimentales et des observations de microstructures qui ont permis leur mise en évidence. L'identification du modèle a été effectuée en utilisant des courbes de traction monotone à 600°C et à différentes vitesses de sollicitation. Le modèle prédit très correctement les courbes de traction de l'acier 316LN à haute température et à différentes vitesses, il reproduit l'effet du vieillissement dynamique lié aux interactions entre dislocations mobiles et atomes de solutés et qui se traduit par un effet négatif de la vitesse de déformation. Les courbes de relaxation prédites par le modèle sont en bon accord avec les données expérimentales. Néanmoins, des améliorations sont à apporter au modèle afin de prendre en compte l'écrouissage cyclique observé en fatigue pure et en fatigue-relaxation. La prise en compte de l'irréversibilité totale du glissement plastique des dislocations en fatigue pure et en fatigue-relaxation s'avère être prometteuse et permettrait d'améliorer les prédictions du modèle et notamment de l'écrouissage cyclique observé expérimentalement.

6. Références

- Auzoux, Q., 2004. Thèse de Doctorat, Ecole Supérieure des Mines de Paris.
- Louat, N., 1981. On the theory of the Portevin-Le Chatelier effect. *Scripta Metallurgica*, vol. 15, p. 1167.
- Bonneville, J., Escaig, B., Martin, J.L., 1988. A study of cross-slip activation parameters in pure copper., *Acta Metall.*, Vol. 36, pp. 1989–2002.
- Déprés, C., 2004. Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble.
- Feaugas, X., 1999. «Contribution à la compréhension des mécanismes de déformation plastique et d'endommagement des matériaux».Mémoire d'habilitation à diriger les recherches.
- Perkins, R. A., Padgett, R. A., Tunali, J. R., 1973. *Metallurgical Transactions*, vol. 4, pp. 2535.
- Sauzay, M., Mottot, M., Allais, L., Noblecourt, M., Monnet, I., Périnet, J., 2004. *Nuclear Ingeneering and Design*, vol. 232, p. 219.
- François, D., Pineau, A., Zaoui, A., 2009. *Comportement mécanique des matériaux, élasticité et plasticité*. Hermes Science Publications.
- Giordana, M. F., Giroux, P. F., Alvarez-Armas, I., Sauzay, M., and Armas, A., 2011. European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes, EUROMAT 2011, 12-15 september 2011, Montpellier, France.
- Viguié, B., et al. 'Creep behaviour and strain rate sensitivity of Ti-6Al-4V alloy', *Creep 2015*, Toulouse, France, 11-06-2015.

Conclusions générales et perspectives

L'objectif de ce travail a été de présenter un modèle micromécanique permettant de mieux appréhender et de modéliser les différents mécanismes caractérisant le comportement mécanique des aciers inoxydables en fatigue pure et en fatigue-relaxation à haute température. Il s'agit plus particulièrement de l'acier austénitique inoxydable 316LN, candidat potentiel pour des composants de circuits des futurs réacteurs de génération VI.

Une démarche progressive a été adoptée tout au long de cette thèse afin d'étudier et d'identifier les différents mécanismes actifs lors de chargements aussi complexes que la fatigue à haute température incluant des longs temps de maintien en relaxation ou en fluage. Une première étape fondamentale a été de faire un état des lieux des différents études issues de la littérature afin de mieux comprendre le comportement de l'acier 316LN en fatigue pure à température ambiante et à haute température ainsi qu'en fatigue-relaxation/fluage. Une étude expérimentale a également été menée dans le but d'explorer l'effet de températures plus faibles que celles étudiées traditionnellement dans la littérature en fatigue-relaxation et avec des temps de maintien assez longs (500°C entre 10h et 50h de maintien en traction). Le phénomène du vieillissement dynamique a également été mis en évidence à travers des essais de tractions à différentes vitesses à 600°C en appliquant des vitesses très faibles.

Les résultats des essais menés à 500°C sont en accord avec ceux obtenus à 600°C et à 550°C pour de faibles amplitudes de déformation imposée. Le temps de maintien induit un léger sur-écrouissage même pour une durée de maintien très longue (50h). La relaxation de la contrainte durant le maintien demeure très limitée. Les observations MET de l'évolution des structures de dislocations avec le temps de maintien montrent l'existence d'un temps de maintien critique nécessaire pour empêcher la formation des structures de dislocations caractéristiques de la fatigue oligocyclique et assurer l'homogénéité de la microstructure. Ce temps critique diminue quand la température augmente (50h à 500°C, 300 min à 550°C et 30 min à 600°C). Nous disposons donc maintenant d'un grand nombre de résultats expérimentaux à des températures, déformations et temps de maintiens différents.

En termes de modélisation, et avant de s'atteler aux phénomènes complexes incluant des chargements cycliques et des temps de maintiens à haute température, nous nous sommes intéressés à la prédiction du comportement de l'acier 316LN, et par l'occasion d'autres polycristaux de structure CFC, en fatigue pure à température ambiante. A l'issue de cette étude, un modèle micromécanique basé sur des lois cristallines identifiées sur des courbes d'écrouissage cyclique expérimentales obtenues sur des monocristaux a été proposé. Deux modèles d'homogénéisation à champs moyen ont été étudiés et leurs prédictions analysées en comparant les courbes macroscopiques ainsi que les distributions des contraintes et des déformations plastiques moyennes par grain prédites par les modèles avec les résultats obtenus par calculs éléments finis cristallins et les données expérimentales disponibles dans la littérature. Le modèle polycristallin distinguant deux populations de grains d'orientations différentes et utilisant la loi de transition d'échelle de Kröner est

celui qui permet le meilleur accord avec les calculs par éléments finis et les courbes expérimentales. À la fin de cette étude, des descriptions analytiques ont été proposées permettant de décrire les distributions normalisées des contraintes et déformations moyennes obtenus par les deux modèles d'homogénéisations (Kröner et Hill-Hutchinson). Cette étape a également permis de valider notre approche multi-échelle en chargement cyclique qui sera ensuite appliquée à des chargements plus complexes.

Dans la troisième partie de ce travail, une modélisation plus physique des mécanismes de déformation a été proposée. Cette description fait appel à des lois basées sur les densités de dislocations et n'utilise aucun paramètre ajustable sur des courbes macroscopiques. Les différents paramètres du modèle ont été identifiés à partir de courbes monocristallines expérimentales et un critère a été proposé permettant de décrire la dépendance du comportement du monocristal/grain vis-à-vis de son orientation cristallographique. Une validation qualitative du modèle a été effectuée pour quatre différents métaux et alliages CFC sollicités en traction monotone à température ambiante. Deux approches d'homogénéisation à champs moyens ont été utilisées comme précédemment : Kröner et Hill-Hutchinson. La validation quantitative reste discutable et varie d'un matériau à un autre. Ceci peut être lié en partie à une description simpliste de l'effet de la taille de grain qui ne prend pas en compte explicitement la planarité du glissement.

Durant la quatrième étape de cette étude, nous nous sommes intéressés à la compréhension et l'identification des mécanismes caractérisant le comportement de l'acier 316LN en fatigue et/ou relaxation à haute température. Des modèles basés sur l'annihilation des dipôles par montée ont été proposés afin de prédire le temps de maintien critique nécessaire pour éviter l'apparition des structures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure. De même, un modèle de visco-plasticité a été identifié permettant d'introduire un volume et une énergie d'activation et le durcissement lié aux interactions entre les dislocations mobiles et les nuages de soluté (vieillessement dynamique). Enfin, une étude numérique a été réalisée afin de valider l'approche d'homogénéisation à champs moyens par rapport aux calculs par éléments finis en élastoviscoplasticité. À l'issue de cette étude, le modèle de Kröner est encore une fois celui qui permet le meilleur accord comparé aux calculs par éléments finis pour des déformations inférieures à 1%.

Enfin, l'ensemble des mécanismes de déformation décrits précédemment a été introduit dans un modèle global de viscoplasticité cristalline via le logiciel SiDoLo. Ce modèle fait appel à trois paramètres ajustables seulement. L'identification a été effectuée grâce aux courbes de traction expérimentales obtenues à 600°C pour différentes vitesses de déformation. Le modèle prédit correctement les courbes de traction de l'acier 316LN à haute température et à différentes vitesses de chargement. Il reproduit l'effet du vieillissement dynamique lié aux interactions entre dislocations mobiles et atomes de solutés et qui se traduit par un effet négatif de la vitesse de déformation pour des vitesses comprises entre $2 \cdot 10^{-3}$ et $2 \cdot 10^{-7} \text{ s}^{-1}$. Les courbes de relaxation prédites par le modèle sont en bon accord avec les données expérimentales. La prise en compte de l'irréversibilité totale a également permis d'améliorer les prédictions du modèle dans ce cas de chargements cycliques (fatigue pure et fatigue-relaxation). Avec cette hypothèse, le modèle prédit un écrouissage cyclique notable comparé à la première hypothèse de la réversibilité totale du glissement des dislocations.

Plusieurs perspectives peuvent être envisagées d'une part afin d'améliorer le modèle proposé et d'autre part afin d'enrichir la base expérimentale ayant permis l'identification des mécanismes et des paramètres du modèle.

Les résultats des essais de traction à 600°C avec saut de vitesses, réalisés dans le cadre de ce travail, n'ont pas pu être exploités dans l'identification des paramètres du modèle. Les sauts de vitesse n'ont pas été suffisamment élevés pour distinguer les sauts de contrainte correspondant. Des essais de ce type peuvent donc être envisagés avec des sauts de vitesses plus importants et à différentes températures (550°C et 500°C), ceci afin de mieux identifier les paramètres du modèle et de valider sa capacité à prédire les trois domaines : trainage, DSA et friction pour les différents paramètres.

En outre et toujours concernant la démarche expérimentale, des analyses plus fines des microstructures de dislocations à 550°C et à 500°C avec différents temps de maintien et pour des niveaux de déformation faibles ou élevés sont à effectuer afin de quantifier plus précisément le temps de maintien critique nécessaire pour éviter la formation des microstructures de dislocations caractéristiques de la fatigue pure. Des observations MET permettront également de mesurer les densités de dislocations et de confronter les prédictions du modèle aux mesures expérimentales à l'échelle locale.

Dans le cadre de cette étude, par manque de temps, les interactions entre dislocations mobiles et nuages de soluté ont été introduites d'une façon relativement simple grâce à une contrainte isotrope qui évolue linéairement avec la concentration des atomes de soluté autour des dislocations. Il serait plus judicieux de perfectionner ce modèle avec l'utilisation d'une loi de type Mott. Dans ce modèle, la contrainte isotrope liée à ces interactions varie en $C_s^{2/3}$, ce qui permettrait de mieux décrire les courbes de traction.

Toujours concernant le modèle, l'introduction d'une variable d'écrouissage cinématique demeure nécessaire afin de prédire l'écrouissage observé expérimentalement à forte déformation en fatigue pure et en fatigue-relaxation à haute température avec une identification des paramètres sur des courbes d'écrouissage cyclique expérimentales sur monocristaux aux températures envisagées. Cet écrouissage est dû à la formation de structures de dislocations : cellules, labyrinthes....